



ИЗДАТЕЛЬСТВО
« М И Р »

THE MANY-BODY PROBLEM IN QUANTUM MECHANICS

by

N. H. MARCH

Professor of Physics in the University of Sheffield

W. H. YOUNG

Oak Ridge National Laboratory, Tennessee

S. SAMPANTHAR

The University of Salford

CAMBRIDGE
AT THE UNIVERSITY PRESS

1967

Н. МАРЧ, У. ЯНГ, С. САМПАНТХАР

ПРОБЛЕМА МНОГИХ ТЕЛ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Перевод с английского

А. Г. БАШКИРОВА и Ю. Г. РУДОГО

Под редакцией

Д. Н. ЗУБАРЕВА и Н. М. ПЛАКИДЫ

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»

Москва 1969

В настоящей книге последовательно, просто и доступно изложена современная квантовая теория систем многих частиц, лежащая в основе теории атомов, молекул, твердых тел (металлов, полупроводников, ионных кристаллов, сверхпроводников) и квантовых жидкостей.

Книга содержит как основные положения теории (метод вторичного квантования, теория возмущений, функции Грина), так и многочисленные ее приложения к конкретным наиболее важным проблемам. Описана и широко используется диаграммная техника Голдстоуна — Хаббарда.

В каждой главе имеются задачи, решение которых поможет читателям лучше овладеть изучаемым материалом.

Книга будет полезна студентам и аспирантам, приступающим к изучению квантовой теории систем многих частиц, молодым специалистам — физикам и инженерам, желающим овладеть современными методами теории твердого тела и повысить свою научную квалификацию.

Редакция литературы по физике

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРОВ ПЕРЕВОДА

В настоящее время в нашей отечественной и зарубежной литературе имеется большое число книг по квантовой теории многих частиц. Однако большинство из них представляет собой либо монографии, рассчитанные на уже подготовленного читателя, либо книги обзорного характера, в которых представлены лишь результаты исследований в этой области, и очень мало книг, где последовательно излагалась бы в доступной для начинающего читателя форме современная квантовая теория многих частиц. Настоящая книга, написанная профессором Н. Марчем совместно с докторами У. Янгом и С. Сампантхаром, восполняет этот пробел. Эта книга является по существу первым учебником по квантовой теории многих частиц и ее приложениям, где сочетается достаточно элементарное изложение основ теории с широким охватом ее приложений.

Первые две главы книги носят вводный характер. Авторы подробно останавливаются на одночастичном приближении и различных формах теории возмущений. В качестве применения этих методов рассчитаны энергии основных состояний и волновые функции малых систем — атомов и молекул.

Гл. 3 посвящена методу вторичного квантования, который применяется далее во всей книге. В гл. 4 последовательно рассматривается теория возмущений для основного состояния больших систем с использованием разработанной Голдстоуном и Хаббардом диаграммной техники, которая позволяет проводить регулярные разложения для энергии основного состояния, содержащие лишь члены, пропорциональные объему системы (теорема о разложении по связанным диаграммам).

Последующие главы (5—8) отведены приложениям развитой теории возмущений. Здесь даны основные результаты теории ферми-жидкости, ядерной материи, сверхпроводимости, фононов в кристаллической решетке, сверхтекучести. Столь широкий круг вопросов вынудил авторов в некоторых главах ограничиться лишь схематическим изложением, например в гл. 7, посвященной теории сверхпроводимости. Однако приведенные авторами ссылки на оригинальную литературу (дополненные переводчиками и редакторами) помогут внимательному читателю компенсировать этот недостаток.

Температурная техника теории возмущений и ее простейшие приложения к теории электронного газа рассмотрены в гл. 9. Книга завершается изложением метода функций Грина как для нулевых, так и для конечных температур. Эта глава написана более сжато и содержит лишь несколько иллюстраций применения метода. Подробное описание метода функций Грина, широко используемого в настоящее время в квантовой статистической физике, читатель может найти в специальных монографиях, посвященных этому методу.

В конце каждой главы имеются снабженные указаниями задачи, решение которых поможет читателю усвоить основное содержание книги. Наиболее громоздкие вычисления приведены в конце книги в виде приложений.

Книга будет полезна широкому кругу читателей, приступающих к изучению квантовой теории многих частиц; здесь имеются в виду прежде всего студенты и преподаватели физико-технических вузов, а также молодые специалисты — физики и инженеры, желающие овладеть современными методами твердого тела и повысить свою научную квалификацию.

Редакторы выражают искреннюю благодарность проф. Марчу за присылку списка исправлений, которые были учтены при переводе.

Перевод выполнили Ю. Г. Рудой (гл. 1—6) и А. Г. Башкиров (гл. 7—10 и приложения).

*Д. Н. Зубарев
Н. М. Плакида*

ИЗ ПРЕДИСЛОВИЯ АВТОРОВ

Наша цель при написании настоящей книги состояла в том, чтобы предоставить читателю, интересующемуся проблемой многих тел, возможность сразу познакомиться как с используемыми в ней методами, так и с ее физическими приложениями. Если исходить из критерииев, установившихся в литературе по теории многих тел, то данную книгу нельзя отнести к числу учебников повышенного типа. Мы исходим в основном из предположения, что читатель хорошо понимает основы квантовой механики.

Мы не могли процитировать все работы, которые внесли важный вклад в развитие проблем, затронутых в книге. Мы считали, что в нашу задачу не входит рассмотрение новейших исследований в отдельных областях, равно как и определение вклада авторов этих исследований, так как обсуждение таких вопросов, по-видимому, более уместно в обзорах.

Мы выражаем искреннюю благодарность всем лицам, помогавшим нам в работе. Вся книга в рукописи была просмотрена проф. Займаном, который сделал многочисленные замечания, способствовавшие значительному улучшению плана и характера изложения.

Совершенно ясно, что полная ответственность за оставшиеся ошибки целиком лежит на авторах. Поскольку мы пытались охватить весьма обширный материал, весьма трудно надеяться на то, что в изложении не встретятся неточности в деталях (а иногда, возможно, даже и в основных положениях). Если читатели сочтут книгу интересной, мы просим их взять на себя труд сообщить нам о любых неясностях или ошибках.

Мы благодарим сотрудников издательства Кембриджского университета за помощь и советы во время продолжительной и трудной работы.

*H. Марч
У. Янг
С. Сампантхар*

ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, даже в классической механике нахождение точных решений проблем взаимодействующих частиц представляет большие трудности. Подобно этому, в квантовой механике едва ли можно назвать хотя бы одну по-настоящему интересную задачу с реальными взаимодействиями, которую можно решить точно. Ввиду этого нам приходится довольствоваться приближенными решениями, которые отражают или существенные черты всей задачи в целом или по крайней мере содержат указание на область применимости этих решений. При использовании приближенных решений для понимания задачи особенно важно как раз четкое определение области применимости теории.

В действительности часто оказывается так, что приближенные физические теории, созданные на основе хорошо развитой физической интуиции, с одной стороны, и применения мощного математического аппарата — с другой, более ценны для понимания всей проблемы, чем любые точные численные решения соответствующих уравнений. В качестве яркого примера такого рода можно упомянуть о том, какое огромное значение для создания стройной и ясной атомной теории имел предложенный Хартри знаменитый метод самосогласованного поля, в котором каждому электрону в атоме приписывается своя волновая функция и уровень энергии; по существу вся атомная теория была построена на этой основе. В молекулярной физике, теории твердого тела, при описании структуры ядерных оболочек и т. п. — всюду идея о сведении задачи многих тел к описанию движения одной частицы в некотором поле, созданном другими частицами, оказалась чрезвычайно плодотворной.

Поэтому весьма естественно избрать в качестве исходного пункта нашего рассмотрения одночастичные приближения. В настоящей главе после краткой формулировки самой проблемы многих тел (§ 2) мы обсудим одночастичные теории, основанные как на понятии матрицы плотности, так и на более привычном понятии волновой функции. Наряду с вариационными методами будут рассмотрены и методы теории возмуще-

ний. В частности, в § 7 основные результаты теории возмущений даются в рамках формализма матрицы плотности, тогда как в § 8 обсуждается более общая теория возмущений, использующая непосредственно волновые функции. Уравнениям Хартри — Фока, составляющим квинтэссенцию одночастичных приближений, посвящен § 10, а полуklassическая, но интуитивно кажущаяся весьма привлекательной теория Томаса — Ферми рассматривается в § 9.

§ 2. ГАМИЛЬТОНИАН И СВОЙСТВА СИММЕТРИИ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Гамильтониан системы N нерелятивистских частиц, взаимодействующих посредством парных сил, имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i < j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (2.1)$$

Если у частиц имеются внутренние степени свободы (чаще всего спин), которые влияют на межчастичное взаимодействие, и если на частицы действует также внешний потенциал, то мы должны обобщить гамильтониан (2.1), записав его в виде

$$H = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i \sigma_i) + \sum_{i < j} v(\mathbf{r}_i \sigma_i, \mathbf{r}_j \sigma_j). \quad (2.2)$$

Здесь одночастичный оператор $U(\mathbf{r}_i \sigma_i)$ содержит оператор кинетической энергии, а σ_i — внутренняя координата i -й частицы (обычно ее спин). Вторая сумма в (2.2) содержит $N(N-1)/2$ членов и этот гамильтониан может быть представлен следующим образом:

$$H = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i \sigma_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N' v(\mathbf{r}_i \sigma_i, \mathbf{r}_j \sigma_j), \quad (2.3)$$

где штрих указывает на то, что слагаемые с $i = j$ опущены.

Мы хотим получить собственные значения и собственные функции этого гамильтониана, а именно нам нужно найти E и Φ , удовлетворяющие уравнению Шредингера

$$H\Phi = E\Phi. \quad (2.4)$$

Как отмечалось в § 1, поскольку в общем случае мы не можем решить уравнение (2.4) точно, мы или решаем его приближенно или, что бывает чаще, заменяем реальную систему

модельной, выбирая последнюю так, чтобы она отражала основные черты реальной системы. Обозначая гамильтониан модельной системы через H_0 , мы точно находим его собственные функции и собственные значения. Далее, если окажется необходимым, мы можем улучшить это приближение путем использования теории возмущений, базирующейся на точном решении для модельной задачи; можно применить также и какой-либо другой подходящий приближенный метод.

Если выбрать в качестве модельного гамильтониана оператор

$$H_0 = \sum_i^N U(\mathbf{r}_i \sigma_i), \quad (2.5)$$

то его собственные значения и собственные функции можно выразить через собственные значения ϵ_l и собственные функции $\phi_l(\mathbf{r}\sigma)$ одночастичного гамильтониана $U(\mathbf{r}\sigma)$

$$U(\mathbf{r}\sigma) \phi_l = \epsilon_l \phi_l. \quad (2.6)$$

Из общего курса квантовой механики мы знаем, что функции ϕ_l можно выбрать таким образом, чтобы они составляли полную систему ортонормированных состояний, т. е.

$$\sum_{\sigma} \int \phi_l^*(\mathbf{r}\sigma) \phi_k(\mathbf{r}\sigma) d\mathbf{r} = \delta_{lk}, \quad (2.7)$$

где δ_{lk} есть δ -символ Кронекера. В (2.7) мы использовали обозначения, отвечающие случаю дискретной переменной σ и дискретных собственных значений ϵ_l в (2.6). Если ϵ_l является непрерывной функцией l , то нужно заменить δ -символ Кронекера в (2.7) δ -функцией Дирака.

Типичная собственная функция гамильтониана (2.5) имеет вид

$$\prod_{i=1}^N \phi_{l_i}(\mathbf{r}_i \sigma_i), \quad (2.8)$$

где ϕ_{l_i} — в общем случае любые (не обязательно различные) N функций из числа собственных функций ϕ_l , определенных уравнением (2.6). Собственное значение, отвечающее собственной функции (2.8), очевидно, равно $\sum_{i=1}^N \epsilon_{l_i}$. Приведенные выше утверждения никак не отображают неразличимость частиц, и для того чтобы продвинуться дальше, мы должны теперь учсть статистику этих частиц.

1. Бозоны

Если мы имеем систему неразличимых бозонов, то любая приемлемая многочастичная волновая функция должна быть симметрична по отношению к перестановке координат любой пары частиц. Для учета этого требования образуем из функций (2.8) симметризованные произведения Φ_L^B , где L — индекс, определяющий совокупность N одночастичных уровней, входящих в симметризованные произведения. Тогда произвольную N -бозонную волновую функцию можно разложить по симметризованным произведениям

$$\Phi^B(\mathbf{r}_1\sigma_1 \dots \mathbf{r}_N\sigma_N) = \sum_L C_L \Phi_L^B(\mathbf{r}_1\sigma_1 \dots \mathbf{r}_N\sigma_N). \quad (2.9)$$

Такое разложение возможно потому, что функции Φ_L^B образуют полный и ортонормированный набор [ср. (2.7)] и, следовательно, являются подходящим базисом для разложения произвольной N -бозонной волновой функции.

2. Фермионы

Для фермионов волновая функция основного и возбужденных состояний должна быть антисимметричной по отношению к перестановке координат (пространственных и спиновых) любой пары частиц. Это требование представляет собой обобщение на систему многих взаимодействующих частиц знаменитого принципа Паули, согласно которому две независимые фермиончицы не могут находиться в одном и том же состоянии.

Таким образом, на этот раз мы должны образовать из функций (2.8) антисимметризованные произведения так, чтобы в них не встречалось даже двух одинаковых одночастичных волновых функций. Эти антисимметризованные произведения, или детерминанты Φ_L^F , образуют базис для разложения N -фермионных волновых функций

$$\Phi^F(\mathbf{r}_1\sigma_1 \dots \mathbf{r}_N\sigma_N) = \sum_L C_L \Phi_L^F(\mathbf{r}_1\sigma_1 \dots \mathbf{r}_N\sigma_N). \quad (2.10)$$

В этом уравнении обычно удобно рассматривать функции Φ_L^F как нормированные детерминанты. Одночастичные состояния ϕ_i , входящие в какой-либо детерминант, будем называть занятыми состояниями (или уровнями), а остальные состояния из числа ϕ_i , составляющие вместе с занятыми состояниями полную систему, — незанятыми состояниями (или уровнями).

3. Дираковские обозначения

Иногда нам будет удобно пользоваться обозначениями Дирака, в которых для $\Phi_l(\mathbf{r}\sigma)$ используется символ $\langle \mathbf{r}\sigma | l \rangle$, а уравнение (2.6) для собственных значений записывается следующим образом:

$$\langle \mathbf{r}\sigma | U | l \rangle = \epsilon_l \langle \mathbf{r}\sigma | l \rangle, \quad (2.11)$$

или, без явного указания на выбор координатного представления, в терминах кет-векторов¹⁾ $| l \rangle$:

$$U | l \rangle = \epsilon_l | l \rangle. \quad (2.12)$$

Тогда условие ортонормированности (2.7) можно записать в виде

$$\sum_{\sigma} \int \langle l | \mathbf{r}\sigma \rangle \langle \mathbf{r}\sigma | k \rangle d\mathbf{r} = \delta_{lk}, \quad (2.13)$$

или, используя тот факт, что

$$\sum_{\sigma} \int | \mathbf{r}\sigma \rangle \langle \mathbf{r}\sigma | d\mathbf{r} = 1,$$

его можно представить следующим образом:

$$\langle l | k \rangle = \delta_{lk}. \quad (2.14)$$

Матричный элемент одочастичного оператора в l -представлении, определяемом соотношением (2.12), имеет вид

$$\sum_{\sigma} \int \Phi_l^*(\mathbf{r}\sigma) U(\mathbf{r}\sigma) \Phi_k(\mathbf{r}\sigma) d\mathbf{r}. \quad (2.15)$$

Выражение (2.15) будет записываться далее как $\langle l | U | k \rangle$. Аналогично матричный элемент двухчастичного оператора в том же l -представлении записывается в виде

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int \int \Phi_i^*(\mathbf{r}_1 \sigma_1) \Phi_j^*(\mathbf{r}_2 \sigma_2) v(\mathbf{r}_1 \sigma_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2) \times \\ \times \Phi_l(\mathbf{r}_1 \sigma_1) \Phi_k(\mathbf{r}_2 \sigma_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \langle ij | v | lk \rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

В случае симметричного взаимодействия v очевидно, что правая часть (2.16) эквивалентна выражению $\langle ji | v | kl \rangle$.

¹⁾ В русской литературе термины „кет“- и „бра“-векторы стали уже общепринятыми (см. А. С. Даудов, Квантовая механика, М., 1963). — Прим. перев.

§ 3. ПЛОСКИЕ ВОЛНЫ И СФЕРА ФЕРМИ

При рассмотрении свободных частиц почти всегда удобнее пользоваться собственными функциями оператора импульса

$$\frac{1}{\Omega^{1/2}} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.1)$$

с периодическими граничными условиями. Иногда используются граничные условия для частицы в прямоугольном ящике и стоячие волны, хотя, как правило, они менее удобны, чем (3.1) (ср. задачу 1.3). Если объем Ω в (3.1) представляет собой куб с ребром L , то \mathbf{k} имеет следующие разрешенные значения:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z), \quad (3.2)$$

где n_x, n_y, n_z принимают все возможные целочисленные значения (положительные, отрицательные и нуль); одночастичные энергии E_k равны $\hbar^2 k^2 / 2m$. Для частиц со спином мы должны умножить (3.1) на соответствующие спиновые волновые функции.

Чтобы не учитывать поверхностные эффекты в случае большой системы с конечной плотностью N/Ω , обычно принято переходить к пределу $N \rightarrow \infty, \Omega \rightarrow \infty$.

Поскольку, согласно (3.2), на единицу объема в \mathbf{k} -пространстве (на единицу объема ящика в указанном пределе) приходится $1/(8\pi^3)$ состояний, правило перехода от суммирования к интегрированию по \mathbf{k} имеет простой вид

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}. \quad (3.3)$$

1. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов

Для одночастичного оператора $U(\mathbf{r})$ матричный элемент перехода между состояниями свободной частицы с волновыми векторами \mathbf{k} и \mathbf{m} дается выражением

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | U(\mathbf{r}) | \mathbf{m} \rangle &= \frac{1}{\Omega} \int e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) e^{i \mathbf{m} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{\Omega} \int U(\mathbf{r}) e^{-i (\mathbf{k} - \mathbf{m}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{1}{\Omega} U(|\mathbf{k} - \mathbf{m}|), \end{aligned} \quad (3.4)$$

где последнее равенство определяет фурье-образ $U(|\mathbf{k} - \mathbf{m}|)$ функции $U(\mathbf{r})$.

В дальнейшем нам часто понадобится матричный элемент двухчастичного оператора, зависящего только от расстояния

между двумя частицами. Мы можем записать его в виде

$$\langle \mathbf{k}l | v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) | mn \rangle =$$

$$= \frac{1}{\Omega^2} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{l} \cdot \mathbf{r}_2} v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{i\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}_2} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (3.5)$$

Перейдем теперь к системе координат центра масс

$$\mathbf{R} = \frac{(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{2}$$

и введем относительную координату

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Тогда, интегрируя по \mathbf{R} в (3.5), получаем

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}l | v | mn \rangle &= \Omega^{-1} \delta_{k+l, m+n} \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{m}) \cdot \mathbf{r}} v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \\ &= \Omega^{-1} \delta_{k+l, m+n} v(|\mathbf{k} - \mathbf{m}|). \end{aligned} \quad (3.6)$$

2. Поверхность Ферми и волновое число Ферми

Волновая функция основного состояния системы N невзаимодействующих бесспиновых фермийонов образуется из первых N одночастичных волновых функций, соответствующих N низшим собственным значениям ϵ_k . Таким образом, занятые состояния в \mathbf{k} -пространстве лежат внутри сферы, называемой сферой Ферми и описывающейся фермиеевским волновым числом k_f и соответствующей энергией Ферми E_f . Согласно (3.3), число частиц N в системе определяется выражением

$$N = \sum_{k < k_f} 1 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{k < k_f} d\mathbf{k},$$

или

$$\frac{N}{\Omega} = \rho_0 = \frac{k_f^3}{6\pi^2}, \quad (3.7)$$

где ρ_0 — средняя плотность числа частиц. Аналогично энергия основного состояния имеет вид

$$E_0 = \sum_{k < k_f} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{k < k_f} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} dk = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_f^2}{m} N. \quad (3.8)$$

Чтобы построить N -частичные волновые функции возбужденных состояний, необходимо включить в детерминантную

N -частичную волновую функцию некоторые одночастичные состояния с $k > k_f$, исключив равное число состояний с $k < k_f$; соответствующие энергии вычисляются без труда.

Наконец, в случае фермионов со спином $1/2$ каждому состоянию с волновым вектором \mathbf{k} соответствуют две вырожденные волновые функции

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\alpha \text{ и } \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\beta,$$

где α и β — обычные спиновые функции. В силу указанного спинового вырождения соотношение (3.7) принимает вид

$$\rho_0 = \frac{k_f^3}{3\pi^2}, \quad (3.9)$$

тогда как энергия E_0/N , приходящаяся на одну частицу, по прежнему равна $3/5 E_f$, как и в (3.8).

С другой стороны, для бозонов основным является такое состояние, в котором все частицы находятся в состоянии с $\mathbf{k} = 0$, и поэтому полная энергия основного состояния системы бозонов равна нулю.

§ 4. МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Соответствующая сфере Ферми (см. § 3) N -частичная волновая функция содержит огромную информацию, подавляющая часть которой несущественна для вычисления многих наиболее важных физических свойств. Вообще говоря, N -частичная волновая функция для системы взаимодействующих частиц (если $N \sim 10^{23}$, как в большинстве представляющих интерес задач, см. гл. 5, 7 и 8) настолько сложна, что полное описание становится немыслимым.

Поэтому очень полезно ввести так называемые матрицы плотности, определяемые с помощью многочастичной волновой функции Φ и интегрирования по ряду переменных; таким образом исключается большое количество излишней информации. Матрицы плотности позволяют сосредоточить внимание на таких физически важных величинах, как плотность числа частиц ρ и парная корреляционная функция g (см. ниже).

Матрицы плотности в соответствии с их определением естественно разделить на одночастичные матрицы плотности, позволяющие вычислять средние значения одночастичных операторов, и двухчастичные матрицы плотности, пригодные для работы с двухчастичными динамическими переменными. Полезно также различать матрицы плотности, зависящие от спина,

и матрицы, в которых суммирование по спиновым переменным уже выполнено. В большинстве случаев нам достаточно определить только последние.

1. Одночастичные матрицы и плотность числа частиц

Общий вид одночастичной матрицы плотности $\gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1\sigma'_1, \mathbf{r}_1\sigma_1)$ определяется с помощью нормированной многочастичной волновой функции $\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N)$ в виде

$$\gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1\sigma'_1, \mathbf{r}_1\sigma_1) = N \sum_{\sigma_2 \dots \sigma_N} \int \Phi^*(\mathbf{r}'_1\sigma'_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N) \times \\ \times \Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (4.1)$$

Очень удобна не зависящая от спина форма матрицы плотности (4.1)

$$\gamma(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) = \sum_{\sigma_1} \gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1\sigma_1, \mathbf{r}_1\sigma_1). \quad (4.2)$$

Нормировочный множитель N в (4.1) введен для того, чтобы диагональный элемент матрицы (4.2) $\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)$ совпадал с плотностью числа частиц $\rho(\mathbf{r}_1)$ (последняя должна, очевидно, при интегрировании давать число частиц N). В § 5, п. 1 мы проведем явное вычисление γ для детерминанта, составленного из плоских волн, но прежде чем использовать матрицу (4.2), введем двухчастичные матрицы.

2. Двухчастичные матрицы и парная функция

Определим теперь по аналогии двухчастичную матрицу плотности

$$\Gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1\sigma'_1, \mathbf{r}'_2\sigma'_2; \mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = \\ = \frac{N(N-1)}{2} \sum_{\sigma_3 \dots \sigma_N} \int \Phi^*(\mathbf{r}'_1\sigma'_1, \mathbf{r}'_2\sigma'_2, \mathbf{r}_3\sigma_3, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N) \times \\ \times \Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \dots, \mathbf{r}_N\sigma_N) d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \quad (4.3)$$

и ее не зависящую от спина форму

$$\Gamma(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \Gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1\sigma_1, \mathbf{r}'_2\sigma_2; \mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2). \quad (4.4)$$

Как и в случае одночастичной матрицы плотности, диагональ-

смысл: он равен числу различных пар частиц, умноженному на плотность вероятности одновременного нахождения одной частицы в точке \mathbf{r}_1 , а другой — в \mathbf{r}_2 . Часто бывает полезно представить диагональный элемент $\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ матрицы (4.4) в виде константы, умноженной на $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, причем константа выбирается так, что $g \rightarrow 1$ при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$; мы будем далее называть $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ парной функцией.

3. Связь между одночастичными и двухчастичными матрицами плотности. Полная энергия

Из определений (4.3) и (4.1) очевидно, что Γ_σ содержит γ_σ ; они связаны следующим соотношением:

$$\gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1\sigma'_1, \mathbf{r}_1\sigma_1) = \frac{2}{N-1} \sum_{\sigma_2} \int \Gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1\sigma'_1, \mathbf{r}_2\sigma_2; \mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) d\mathbf{r}_2. \quad (4.5)$$

Аналогично для бесспиновых форм матриц плотности

$$\gamma(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) = \frac{2}{N-1} \int \Gamma(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2. \quad (4.6)$$

Для дальнейшего полезно выразить полную энергию системы E через матрицы плотности. Для этого заметим, что точная энергия состояния, определяемого полной волновой функцией Φ , описывается соотношением

$$E = \sum_{\text{спин}} \int \Phi^* H \Phi d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (4.7)$$

Предположим, что гамильтониан имеет вид (2.2), но не содержит зависимости от спина, и представим одночастичный оператор $\sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i)$ в явной форме

$$\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U_1(\mathbf{r}_i) \right). \quad (4.8)$$

Ясно, что среднее значение этого одночастичного оператора можно выразить через $\gamma(\mathbf{r}', \mathbf{r})$. Аналогично в гамильтониане (2.2) среднее значение двухчастичного оператора

$$\sum_{i < j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (4.9)$$

зависит только от диагонального элемента $\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. С помощью элементарных вычислений можно показать, что окон-

чательное выражение для полной энергии имеет вид

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \int [\nabla^2 \gamma(\mathbf{r}', \mathbf{r})]_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} d\mathbf{r} + \int U_1(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\ + \int v(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (4.10)$$

§ 5. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ ДИРАКА

При вычислении определенных выше матриц плотности следует использовать точные многочастичные волновые функции. Однако в том случае, когда полная волновая функция записывается в виде детерминанта, составленного из одночастичных состояний, матрицы плотности принимают особенно простой вид, на что впервые указал Дирак [53]. Так, если волновая функция Φ записывается следующим образом:

$$\Phi = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \det \varphi_i(\mathbf{r}_j \sigma_j), \quad (5.1)$$

то легко показать, что в этом случае

$$\gamma_\sigma(\mathbf{r}' \sigma', \mathbf{r} \sigma) = \sum_i^N \varphi_i^*(\mathbf{r}' \sigma') \varphi_i(\mathbf{r} \sigma), \quad (5.2)$$

где функции φ_i — одночастичные состояния, входящие в детерминант. Аналогично, двухчастичная матрица плотности имеет вид

$$\Gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1 \sigma'_1, \mathbf{r}'_2 \sigma'_2; \mathbf{r}_1 \sigma_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1 \sigma'_1, \mathbf{r}_1 \sigma_1) & \gamma_\sigma(\mathbf{r}'_1 \sigma'_1, \mathbf{r}_2 \sigma_2) \\ \gamma_\sigma(\mathbf{r}'_2 \sigma'_2, \mathbf{r}_1 \sigma_1) & \gamma_\sigma(\mathbf{r}'_2 \sigma'_2, \mathbf{r}_2 \sigma_2) \end{vmatrix}. \quad (5.3)$$

Если мы рассматриваем уровни, занятые двумя фермионами с противоположно направленными спинами, то состояния $\varphi_i(\mathbf{r}_j \sigma_j)$ строятся просто в виде произведений $N/2$ пространственных орбиталей $\varphi_i(\mathbf{r}_j)$ и спиновых функций α и β . Отсюда следует, что

$$\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2 \sum_i^{N/2} \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) \varphi_i(\mathbf{r}_2) \quad (5.4)$$

и

$$2\Gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) - \frac{1}{2} [\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]^2. \quad (5.5)$$

Соотношения (5.2) и (5.4) служат определением матрицы плотности Дирака (второе из них, разумеется, в ее зависящей от спина форме). Далее, если волновую функцию можно представить в виде одного детерминанта, то, как видно из (5.5), матрица Дирака определяет и двухчастичную матрицу плотности.

В общем случае это утверждение несправедливо. Объединяя формулы (5.4) и (5.5) с выражением для энергии (4.10), легко видеть, что наилучшие (в смысле вариационного метода) орбитали Φ_i можно получить путем минимизации этого выражения. Указанная процедура составляет содержание теории Хартри–Фока, которую мы обсудим в § 10.

Во многих случаях нас могут интересовать одночастичные орбитали, которые не являются наилучшими из всех возможных, но удовлетворяют одночастичному волновому уравнению

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \Phi_i(\mathbf{r}), \quad (5.6)$$

где $V(\mathbf{r})$ – потенциал, общий для всех движущихся в нем частиц (этот потенциал определяется на конечном этапе вычислений с помощью процедуры „самосогласования“). Такое вычисление будет проведено более детально в гл. 2, § 2, п. 3 на примере атомов; пока же мы будем считать потенциал $V(\mathbf{r})$ заданным.

В этом упрощенном случае задача сводится к нахождению матрицы плотности Дирака в виде функционала от $V(\mathbf{r})$. К сожалению, до сих пор не найдено ни одного замкнутого решения этой задачи для произвольного потенциала $V(\mathbf{r})$. Однако практически наиболее важным является случай основного состояния системы, в котором заполнены N низших одночастичных уровней. В этом случае, как показали Марч и Меррей [141, 142], можно получить интересное решение с помощью теории возмущений; мы воспроизведем ниже их результат. При построении разложения для матрицы плотности Марч и Меррей выбирали за основу систему плоских волн, поэтому удобно привести здесь явные выражения для матриц плотности в случае свободных частиц.

1. Формулы для случая плоских волн

В качестве простого, но тем не менее важного примера вычисления матриц плотности γ и Γ в однодетерминантном приближении, найдем указанные величины для случая основного состояния системы свободных частиц (см. § 3). Подставляя в определение (5.4) одночастичные волновые функции

$$\frac{1}{\Omega^{1/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

получаем

$$\gamma(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \frac{2}{\Omega} \sum_{k < k_f} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (5.7)$$

Переходя затем от суммирования к интегрированию согласно (3.3), находим

$$\gamma(r', r) = \frac{2}{8\pi^3} \int_{k < k_f} e^{ik \cdot (r - r')} dk. \quad (5.8)$$

Интегрирование по углам в (5.8) соответствует просто замене плоской волны $e^{ik \cdot r}$ на s -волну $(\sin kr)/kr$, полученную при разложении плоской волны по сферическим гармоникам. Поэтому

$$\gamma(r', r) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_f} k \frac{\sin k|r' - r|}{|r' - r|} dk = \frac{k_f^3}{\pi^2} \frac{j_1(k_f|r' - r|)}{k_f|r' - r|}, \quad (5.9)$$

где $j_1(x)$ — сферическая функция Бесселя первого порядка, определяемая равенством

$$j_1(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^2}. \quad (5.10)$$

Переходя в (5.9) к пределу $r' \rightarrow r$ и замечая, что $j_1(x) \rightarrow x/3$ для малых значений x , сразу приходим к соотношению

$$\gamma(r, r) = \frac{k_f^3}{3\pi^2}, \quad (5.11)$$

правая часть которого есть не что иное как постоянная плотность числа частиц ρ_0 , определяемая соотношением (3.9).

Двухчастичную матрицу плотности легко найти, пользуясь соотношением (5.3); в частности, подставляя $\gamma(r', r)$ из (5.9) в (5.5), находим диагональный элемент этой матрицы

$$\Gamma(r_1, r_2; r_1, r_2) = \frac{k_f^6}{18\pi^4} - \frac{k_f^6}{4\pi^4} \left\{ \frac{j_1(k_f|r_1 - r_2|)}{k_f|r_1 - r_2|} \right\}^2. \quad (5.12)$$

Отсюда для парной корреляционной функции получаем выражение

$$g(r) = 1 - \frac{9}{2} \left\{ \frac{j_1(k_f r)}{k_f r} \right\}^2. \quad (5.13)$$

Приведенные явные выражения для $\gamma(r', r)$ и $g(r)$ играют основную роль при рассмотрении взаимодействия между электронами в гл. 5, а также при построении теории возмущений на основе плоских волн в § 7.

§ 6. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ БЛОХА

Для того чтобы получить матрицу плотности Дирака, удобно сначала ввести тесно связанную с ней величину, называемую матрицей плотности Блоха. Эта матрица определяется

с помощью волновых функций $\phi_i(\mathbf{r})$ и энергетических уровней ϵ_i , удовлетворяющих уравнению (5.6), следующим образом:

$$C(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta) = \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}) e^{-\epsilon_i \beta}, \quad (6.1)$$

где $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Как мы увидим ниже, $C(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta)$ представляет собой „обобщенную статистическую сумму“ в том смысле, что если произвести „интегрирование диагональной матрицы“ $C(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta)$ ¹⁾, то мы получим обычную статистическую сумму. В гл. 9 мы уделим много внимания статистической механике системы взаимодействующих частиц; здесь же мы ввели матрицу Блоха (6.1), чтобы вычислить с ее помощью матрицу ψ . Следует отметить, что в определение (6.1) входят лишь те уровни, на которых находится по одной частице.

1. Уравнение Блоха

Прежде чем заняться выводом соотношения между C и ψ , заметим, что если подействовать на матрицу C одночастичным гамильтонианом (для упрощения обозначений мы используем здесь систему единиц, в которой $\hbar = 1$, $m = 1$)

$$H_s = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (6.2)$$

и сравнить результат с производной C по β , то мы придем к так называемому уравнению Блоха

$$H_s C = -\frac{\partial C}{\partial \beta}. \quad (6.3)$$

Уравнение (6.3) совпадает по форме с зависящим от времени уравнением Шредингера, причем β играет роль $i t$; в гл. 9 мы широко используем эту аналогию. Границное условие

$$C(\mathbf{r}'\mathbf{r}0) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \quad (6.4)$$

необходимое для определения решения уравнения (6.3), следует из свойства полноты системы собственных функций. Таким образом, опираясь на (6.3) и (6.4), можно, по крайней мере в принципе, вычислить матрицу C ; такие вычисления были выполнены Грином [88], который исходил из решения задачи для свободных частиц и использовал итерационный подход.

¹⁾ То есть взять штур $\int d\mathbf{r} C(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta) |_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}}$ матрицы Блоха $C(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta)$. — Прим. перев.

Вычисления Грина носят очень общий характер; ниже мы приведем вывод Марча и Меррея [142], преимуществом которого является его простота. Кроме того, этот вывод более удобен для последующего вычисления матрицы плотности Дирака. Прежде чем приступить к нахождению C с помощью теории возмущений, установим взаимосвязь между матрицами плотности Блоха и Дирака.

2. Связь с матрицей плотности Дирака

Введем теперь функцию

$$G(\mathbf{r}'\mathbf{r}\epsilon) = \sum_i \varphi_i^*(\mathbf{r}') \varphi_i(\mathbf{r}) \delta(\epsilon - \epsilon_i) \quad (6.5)$$

и определим уровень Ферми ζ как точную верхнюю границу множества занятых уровней. Тогда мы можем записать

$$\gamma(\mathbf{r}'\mathbf{r}\zeta) = \int_0^\zeta G(\mathbf{r}'\mathbf{r}\epsilon) d\epsilon. \quad (6.6)$$

Здесь мы предположили, что все энергетические уровни, определяемые уравнением (5.6), положительны (это всегда можно обеспечить подходящим выбором потенциала V). Объединяя (6.1) и (6.5), имеем

$$\begin{aligned} C(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta) &= \int_0^\infty G(\mathbf{r}'\mathbf{r}\epsilon) e^{-\beta\epsilon} d\epsilon = \\ &= \beta \int_0^\infty \left\{ \int_0^E G(\mathbf{r}'\mathbf{r}E) dE \right\} e^{-\beta E} dE = \beta \int_0^\infty \gamma(\mathbf{r}'\mathbf{r}\zeta) e^{-\beta\zeta} d\zeta. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Отсюда видно, что если удастся найти матрицу $C(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta)$, то матрицу $\gamma(\mathbf{r}'\mathbf{r}\zeta)$ можно получить, применяя к C/β обратное преобразование Лапласа. Отметим также, что функция G , определенная соотношением (6.5), является функцией Грина и будет рассматриваться в гл. 10.

§ 7. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ПЛОСКИХ ВОЛН

Как показали Зондгеймер и Вильсон [191], уравнение Блоха (6.3) с граничным условием (6.4) легко решить для системы свободных электронов, причем решение, как нетрудно проверить, можно представить в следующем виде:

$$C_0(\mathbf{r}'\mathbf{r}\beta) = (2\pi\beta)^{-3/2} e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2/2\beta}. \quad (7.1)$$

Заметим, что, полагая $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ и интегрируя по объему Ω , мы получаем статистическую сумму $\sum_i e^{-\beta E_i}$ в виде

$$\frac{\Omega (k_B T)^{3/2}}{(2\pi)^{3/2}}. \quad (7.2)$$

В используемой нами системе единиц это выражение совпадает с известным результатом теории идеального газа.

1. Матрица плотности Блоха

Решим теперь уравнение Блоха (6.3), рассматривая $V(\mathbf{r})$ как возмущение. Удобно перейти при этом от дифференциальной формы уравнения (6.3) к интегральной, именно

$$C(\mathbf{r}\mathbf{r}_0\beta) = C_0(\mathbf{r}\mathbf{r}_0\beta) - \int d\mathbf{r}_1 \int_0^\beta d\beta_1 C_0(\mathbf{r}\mathbf{r}_1\beta - \beta_1) V(\mathbf{r}_1) C(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_0\beta_1), \quad (7.3)$$

что позволяет учесть граничное условие (6.4) в самом уравнении. В справедливости этого уравнения можно убедиться непосредственной подстановкой его в уравнение Блоха (6.3). Будем решать уравнение (7.3) методом итераций, для чего в качестве первого шага заменим в нем C на C_0 под знаком интеграла. Возникающий при этом интеграл

$$\int_0^\beta d\beta_1 C_0(\mathbf{r}\mathbf{r}_1\beta - \beta_1) C_0(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_0\beta_1) \quad (7.4)$$

можно вычислить, привлекая теорему о преобразовании Лапласа для свертки (см. [142]). Продолжая указанную итерационную процедуру, мы приходим в итоге к результату, который можно записать в следующем виде:

$$C(\mathbf{r}\mathbf{r}_0\beta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l(\mathbf{r}\mathbf{r}_0\beta), \quad (7.5)$$

где

$$C_l(\mathbf{r}\mathbf{r}_0\beta) = (2\pi\beta)^{-3/2} \int \prod_{l=1}^{(l)} \left\{ -\frac{d\mathbf{r}_l V(\mathbf{r}_l)}{2\pi} \right\} \left(\sum_{l=1}^{l+1} s_l \right) \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta} \left(\sum_{l=1}^{l+1} s_l \right)^2 \right\} \left\{ \prod_{l=1}^{l+1} s_l \right\}^{-1} \quad (7.6)$$

и

$$s_l = |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l-1}|, \quad \mathbf{r}_{l+1} = \mathbf{r}.$$

2. Матрица плотности Дирака

Теперь мы можем воспользоваться преобразованием Лапласа (6.7), которое связывает матрицы γ и C/β и получить таким образом матрицу плотности Дирака. Полагая $2E = k^2$, запишем сразу окончательный результат:

$$\gamma(r r_0 k) = \sum_{j=0}^{\infty} \gamma_j(r r_0 k), \quad (7.7)$$

где

$$\gamma_j(r r_0 k) = \frac{k^2}{2\pi^2} \int \prod_{l=1}^j \left\{ -\frac{d\Gamma_l V(\Gamma_l)}{2\pi} \right\} j_1 \left(k \sum_{l=1}^{j+1} s_l \right) \left\{ \prod_{l=1}^{j+1} s_l \right\}^{-1}. \quad (7.8)$$

Индекс j в (7.7) указывает порядок соответствующего члена ряда теории возмущений и совершенно не связан с индексом σ , которым отмечались в § 4 зависящие от спина матрицы плотности. Выписывая из разложения (7.7) члены низших порядков, имеем прежде всего (при $j=0$)

$$\gamma_0(r r_0 k) = \frac{k^2}{2\pi^2} \frac{j_1(k|r-r_0|)}{|r-r_0|}. \quad (7.9)$$

Этот результат отличается от матрицы плотности Дирака для свободных частиц (5.9) только тем, что здесь не учено вырождение по спину. Далее, член первого порядка ($j=1$) имеет вид

$$\gamma_1(r r_0 k) = -\frac{k^2}{2\pi^2} \int d\Gamma_1 \frac{V(\Gamma_1)}{2\pi} \frac{j_1(k|r-\Gamma_1| + k|\Gamma_1-r_0|)}{|r-\Gamma_1||\Gamma_1-r_0|}. \quad (7.10)$$

Мы используем полученные здесь результаты в § 9 при построении теории Томаса — Ферми. Выражение (7.10) играет важную роль в гл. 5, где рассматривается экранирование в электронном газе. Обратимся теперь к теории возмущений, сформулированной в терминах волновых функций.

§ 8. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ПРОИЗВОЛЬНЫХ НЕВОЗМУЩЕННЫХ СОСТОЯНИЙ

В § 7 была развита теория возмущений для матрицы плотности; невозмущенное состояние в этой теории строилось из собственных функций оператора кинетической энергии. Благодаря простому виду матрицы плотности нулевого порядка в этом случае можно было провести необходимые вычисления во всех порядках теории возмущений.

Во многих случаях бывает полезно более тщательно подойти к выбору невозмущенного решения. Правда, в таких случаях в значительной мере теряются преимущества развитого метода,

так как мы лишаемся возможности найти явный вид матриц плотности в нулевом приближении. Таким образом, мы приведем ниже лишь формальные результаты теории возмущений, которая строится в терминах волновых функций.

Существует еще и другая причина того, почему мы рассматриваем здесь теорию возмущений указанного типа. Дело в том, что обе формы теории возмущений, а именно форма Бриллюэна – Вигнера и форма Рэлея – Шредингера, ведут к нефизическому характеру разложений для энергии при бесконечном увеличении числа частиц в системе, как это будет установлено при детальном анализе обеих теорий в гл. 4. Мы увидим, что теорию Рэлея – Шредингера удается все же приспособить для работы с системами многих частиц, тогда как трудности в теории Бриллюэна – Вигнера, по-видимому, являются принципиальными. Важно уже сейчас ознакомиться со структурой обеих теорий, так как это позволит нам довольно быстро перейти к существу вопроса в гл. 4, где мы применим теорию возмущений к проблеме многих частиц.

1. Сдвиг уровня

Рассмотрим произвольную квантовомеханическую систему, описываемую гамильтонианом

$$H = H_0 + V; \quad (8.1)$$

здесь H_0 – невозмущенный, или модельный, гамильтониан, V – оператор возмущения. Предположим, что нам известны собственные значения гамильтониана H_0 и его нормированные собственные кет-векторы, удовлетворяющие следующему уравнению:

$$(H_0 - E_i) |\xi_i\rangle = 0 \quad (i = 0, 1, 2, \dots). \quad (8.2)$$

Собственное значение E_0 в (8.2) соответствует основному состоянию $|\xi_0\rangle$ невозмущенной системы, которое предполагается невырожденным.

Нас будет интересовать вычисление собственного кет-вектора $|\psi\rangle$ и собственного значения E для основного состояния системы с полным гамильтонианом H , которые определяются из уравнения

$$(E - H_0 - V) |\psi\rangle = 0. \quad (8.3)$$

Пусть кет-вектор $|\psi\rangle$ нормирован так, что

$$\langle \xi_0 | \psi \rangle = 1, \quad (8.4)$$

тогда из (8.2) и (8.3) получаем

$$\langle \psi | H_0 | \xi_0 \rangle = E_0 \langle \psi | \xi_0 \rangle \quad (8.5)$$

и

$$\langle \xi_0 | H_0 | \psi \rangle + \langle \xi_0 | V | \psi \rangle = E \langle \xi_0 | \psi \rangle. \quad (8.6)$$

Вычитая (8.5) из (8.6), используя свойство эрмитовости H_0 и условие нормировки (8.4), находим для сдвига уровня энергии основного состояния $E - E_0$ точную формулу

$$E - E_0 = \langle \xi_0 | V | \psi \rangle. \quad (8.7)$$

Разумеется, само по себе выражение (8.7) практически бесполезно, так как в него входит не известная пока волновая функция $|\psi\rangle$.

2. Возмущенная волновая функция

Введем теперь проекционный оператор P такой, что применение его к любому кет-вектору $|\psi\rangle$ дает его компоненту $\langle \xi_0 | \psi \rangle$, умноженную на кет-вектор $|\xi_0\rangle$. Таким образом,

$$P|\psi\rangle = |\xi_0\rangle \quad (8.8)$$

и, следовательно,

$$|\psi\rangle = |\xi_0\rangle + (1 - P)|\psi\rangle = |\xi_0\rangle + Q|\psi\rangle. \quad (8.9)$$

Соотношение (8.9) определяет новый оператор Q , который, так же как и P , является проекционным оператором. Действительно, как видно из (8.9), $Q^2 = Q$, поскольку $P^2 = P$. Кроме того, согласно (8.3) для произвольного ϵ имеем

$$(\epsilon - H_0)|\psi\rangle = (\epsilon - E + V)|\psi\rangle, \quad (8.10)$$

или

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\epsilon - H_0} (\epsilon - E + V)|\psi\rangle; \quad (8.11)$$

последнее равенство равносильно (8.10). Подставляя (8.11) в правую часть (8.9), приходим к следующему уравнению для $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = |\xi_0\rangle + Q \frac{1}{\epsilon - H_0} (\epsilon - E + V)|\psi\rangle. \quad (8.12)$$

Решая это уравнение методом итераций, получаем

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \frac{Q}{\epsilon - H_0} (\epsilon - E + V) \right\}^n |\xi_0\rangle. \quad (8.13)$$

Возвращаясь теперь к точной формуле (8.7) для сдвига уровня и подставляя в нее в качестве $|\psi\rangle$ выражение (8.13), находим окончательно

$$E - E_0 = \sum_0^{\infty} \langle \xi_0 | V \left\{ \frac{Q}{\epsilon - H_0} (\epsilon - E + V) \right\}^n | \xi_0 \rangle. \quad (8.14)$$

3. Теория Бриллюэна — Вигнера

Формулы теории Бриллюэна — Вигнера сразу получаются из общих выражений (8.13) и (8.14), если положить в них $\epsilon = E$. Тогда можно записать $|\psi\rangle$ и $E - E_0$ соответственно в виде

$$|\psi\rangle = \sum_0^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E - H_0} V \right\}^n |\xi_0\rangle \quad (8.15)$$

и

$$E - E_0 = \sum_0^{\infty} \langle \xi_0 | V \left\{ \frac{Q}{E - H_0} V \right\}^n | \xi_0 \rangle. \quad (8.16)$$

Как мы увидим ниже, характерная черта формулировки Бриллюэна — Вигнера состоит в том, что искомая энергия E появляется в обеих частях равенства (8.16). Иначе обстоит дело в методе Рэлея — Шредингера, к рассмотрению которого мы теперь переходим.

4. Теория Рэлея — Шредингера

В теории Рэлея — Шредингера величина ϵ , входящая в (8.13) и (8.14), принимается просто равной E_0 , так что указанные выражения записываются соответственно в виде

$$|\psi\rangle = \sum_0^{\infty} \left\{ \frac{Q}{E_0 - H_0} (E_0 - E + V) \right\}^n |\xi_0\rangle \quad (8.17)$$

и

$$E - E_0 = \sum_0^{\infty} \langle \xi | V \left\{ \frac{Q}{E_0 - H_0} (E_0 - E + V) \right\}^n | \xi_0 \rangle. \quad (8.18)$$

С помощью выражений (8.17) и (8.18) можно получить $|\psi\rangle$ и $E - E_0$ с любой желаемой степенью точности по возмущению V . На этом мы пока заканчиваем рассмотрение теории возмущений; в гл. 4 мы займемся изучением структуры членов разложения низших порядков.

§ 9. ТЕОРИЯ ТОМАСА — ФЕРМИ

Рассмотрев общую теорию возмущений в терминах волновых функций, вернемся теперь к разложению (7.7) для матрицы плотности Дирака с тем, чтобы построить теорию Томаса — Ферми. Эта теория основана на одночастичном волновом уравнении (5.6), но, кроме того, в ней используется предположение о весьма медленном изменении потенциала $V(\mathbf{r})$ на расстояниях порядка характеристической длины волны фермионов (например, в электронном газе роль такой характеристической длины играет длина волны де Броиля $2\pi/k_f$ для электрона, находящегося на поверхности Ферми). Указанное предположение означает, что в диагональном элементе

$$\gamma_1(\mathbf{r}\mathbf{r}k) = -\frac{k^2}{2\pi^2} \int d\mathbf{r}_1 \frac{V(\mathbf{r}_1)}{2\pi} \frac{j_1(2k|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|^2} \quad (9.1)$$

одночастичной матрицы плотности (7.10) потенциал $V(\mathbf{r}_1)$ можно аппроксимировать значением $V(\mathbf{r})$. Тогда интегрирование в (9.1) выполняется без труда, и мы получаем

$$\gamma_1(\mathbf{r}\mathbf{r}k) = -\frac{kV(\mathbf{r})}{2\pi^2}. \quad (9.2)$$

Аналогично можно вычислить члены высших порядков в (7.7); в итоге имеем

$$\gamma(\mathbf{r}\mathbf{r}k) = \frac{k^3}{6\pi^2} \left(1 - \frac{3V}{k^2} + \frac{3V^2}{2k^4} + \frac{V^3}{2k^6} + \dots \right) = \frac{1}{6\pi^2} (k^2 - 2V(\mathbf{r}))^{3/2},$$

или

$$\gamma(\mathbf{r}\mathbf{r}E) = \frac{2^{3/2}}{6\pi^2} [E - V(\mathbf{r})]^{3/2}. \quad (9.3)$$

Имеинко соотношение (9.3) между плотностью и потенциалом характеризует приближение Томаса — Ферми. При применении этого соотношения к физическим задачам необходимо, как правило, знать γ на поверхности Ферми, т. е. при $E = E_f$. Как обычно, сама энергия Ферми E_f определяется затем из условия $\int \gamma d\mathbf{r} = N$, где N — полное число частиц в системе.

Полезно дополнить проведенный выше формальный вывод соотношения (9.3), основанный на теории возмущений для матрицы плотности, выводом, опирающимся на элементарные физические соображения.

Разделим все пространство, занимаемое ферми-газом, на малые области и примем, что в пределах каждой из них плотность $\gamma(\mathbf{r})$ весьма медленно изменяется с пространственной координатой. Тогда диагональный элемент матрицы плотности

Дирака $\gamma(r)$ связан с максимальным (фермиевским) импульсом $p_f(r)$ обычным для однородного ферми-газа соотношением [ср. (5.11)]:

$$\gamma(r) = \frac{8\pi}{3h^3} p_f^3(r). \quad (9.4)$$

Теперь следует выразить $p_f(r)$ через потенциал $V(r)$, в котором происходит движение фермионов. Для этого достаточно записать классическое выражение для энергии самого быстрого фермиона, т. е. фактически использовать определение энергии Ферми

$$E_f = \frac{p_f^2(r)}{2m} + V(r). \quad (9.5)$$

Объединяя (9.4) и (9.5), мы сразу же получаем соотношение (9.3), если используем систему единиц, в которой $\hbar=1$, $m=1$, и учтем, что на каждом энергетическом уровне находится по две частицы.

Мы применим соотношение (9.3) в гл. 2 при изучении свойств атомов, в частности для вычисления энергий связи тяжелых атомов.

§ 10. УРАВНЕНИЯ ХАРТРИ — ФОКА

Как уже указывалось в § 5, чтобы получить наилучшее одночастичное описание системы многих частиц, необходимо минимизировать выражение для энергии (4.10) по отношению к орбиталям Φ_i , входящим в полную волновую функцию, представленную в виде одного детерминанта. До сих пор мы довольствовались меньшим; в частности, нам было достаточно знать одночастичные функции Φ_i , удовлетворяющие уравнению (5.6) с общим для всех частиц потенциалом $V(r)$. Теория Томаса — Ферми, развитая в § 9, дает простой метод нахождения самосогласованного поля $V(r)$ (подробно этот вопрос рассмотрен в гл. 2). Можно улучшить метод Томаса — Ферми, если, сохранив понятие общего для всех частиц потенциального поля, отказаться от дополнительных приближений, касающихся градиента потенциала. По существу в этом и заключается метод, описанный в § 7. К сожалению, окончательный результат (7.7) представляет собой ряд теории возмущений, просуммировать который пока не удалось.

Естественно, мы вынуждены поэтому обратиться к уравнениям, определяющим наилучший выбор Φ_i . Мы приходим таким образом к теории Хартри — Фока. Чтобы вывести основные уравнения этой теории, рассмотрим систему N бесспиновых фермионов (наличие спина легко учесть; мы опускаем его здесь

для упрощения обозначений). Эта система описывается гамильтонианом

$$H = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i) + \sum_{i < j} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (10.1)$$

В качестве модельного можно выбрать гамильтониан

$$H_0 = \sum_{i=1}^N H_s(\mathbf{r}_i); \quad (10.2)$$

используя волновую функцию основного состояния модельной системы в качестве пробной волновой функции в (4.10), мы можем определить верхнюю границу энергии основного состояния реальной системы¹⁾.

Непосредственно видно, что при выборе модельного гамильтониана (10.2) волновая функция основного состояния модельной системы имеет уже известный вид [ср. (5.1)]

$$\Phi_m = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \det \psi_i(\mathbf{r}_j). \quad (10.3)$$

Здесь $\psi_i(\mathbf{r})$ ($i = 1, \dots, N$) представляет собой N собственных функций, относящихся к низшим собственным значениям одночастичного гамильтониана H_s , конкретный вид которого пока не задан. Одночастичные состояния ψ_i выбираются так, чтобы выполнялось условие ортонормированности

$$\int \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{ij}. \quad (10.4)$$

1. Одночастичный самосогласованный гамильтониан

Среднее значение гамильтониана H , найденное с помощью волновой функции (10.3), имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \Phi_m | H | \Phi_m \rangle = & \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | U | \psi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle \psi_i \psi_j | v | \psi_i \psi_j \rangle - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle \psi_i \psi_j | v | \psi_j \psi_i \rangle. \end{aligned} \quad (10.5)$$

Для того чтобы это среднее значение имело минимум по отношению к вариациям функций ψ_i при одновременном выполнении

¹⁾ Это утверждение, которое авторы приводят без доказательства, составляет содержание хорошо известного минимального принципа В. А. Фока [Zs. Phys., 61, 126 (1930)]. — Прим. перев.

дополнительного условия (10.4), должно быть справедливо следующее равенство:

$$\sum_{i=1}^N \langle \delta\psi_i | U | \psi_i \rangle + \sum_{ij} \langle \delta\psi_i \psi_j | v | \psi_i \psi_j \rangle - \sum_{ij} \langle \delta\psi_i \psi_j | v | \psi_j \psi_i \rangle + \sum_{ij} \lambda_{ij} \langle \delta\psi_i | \psi_j \rangle = 0, \quad (10.6)$$

где λ_{ij} — множители Лагранжа.

Поскольку равенство (10.6) должно быть справедливо для произвольных вариаций $\langle \delta\psi_i |$, мы приходим к уравнению

$$U\psi_i(\mathbf{r}_1) + \sum_j \int \psi_j^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi_j(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \psi_i(\mathbf{r}_1) - \sum_j \int \psi_j^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi_i(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \psi_j(\mathbf{r}_1) - \sum_j \lambda_{ij} \psi_j(\mathbf{r}_1) = 0. \quad (10.7)$$

С помощью множителей λ_{ij} и функций $\psi_i(\mathbf{r})$, удовлетворяющих условию (10.4) и уравнению (10.7), мы можем определить подходящий одночастичный гамильтониан H_s . Именно, умножая (10.7) слева на $\psi_k(\mathbf{r}_1)$ и интегрируя по \mathbf{r}_1 , мы получаем матричные элементы некоторого одночастичного оператора H_s в представлении, определяемом набором функций $\psi_1, \dots, \psi_r, \dots$:

$$\langle \psi_k | H_s | \psi_i \rangle = \langle \psi_k | U | \psi_i \rangle + \langle \psi_k \psi_j | v | \psi_i \psi_j \rangle - \langle \psi_k \psi_j | v | \psi_j \psi_i \rangle = \lambda_{ik}. \quad (10.8)$$

Выбирая новые одночастичные волновые функции Φ_1, \dots, Φ_N в виде подходящих линейных комбинаций функций ψ_1, \dots, ψ_N , можно привести гамильтониан H_s к диагональной форме:

$$\langle k | H_s | i \rangle = \epsilon_i \delta_{ik}. \quad (10.9)$$

[В (10.9) использовано обозначение $\langle k | H_s | i \rangle$ для матричных элементов $\langle \Phi_k | H_s | \Phi_i \rangle$ в ф-представлении.] В терминах новых волновых функций Φ_i уравнения (10.7) принимают вид

$$U\Phi_i(\mathbf{r}_1) + \sum_j \int \Phi_j^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Phi_j(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \Phi_i(\mathbf{r}_1) - \sum_j \int \Phi_j^*(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \Phi_i(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \Phi_j(\mathbf{r}_1) = \epsilon_i \Phi_i(\mathbf{r}_1). \quad (10.10)$$

Система уравнений (10.10) и составляет основу теории Хартри — Фока.

2. Физическая интерпретация уравнений Хартри — Фока

Чтобы уяснить смысл одночастичных уравнений (10.10), удобно конкретизировать вид взаимодействия в системе. В дальнейшем мы будем считать, что между частицами действуют кулоновские силы. Целесообразность такого выбора состоит, в частности, в том, что он естественным образом подводит нас к проведенному в гл. 2 рассмотрению задач, связанных со структурой атомов и молекул. Очевидно, в случае кулоновских сил второе слагаемое в левой части уравнений (10.10) равно искомой одноэлектронной волновой функции, умноженной на потенциальную энергию (в точке r_1) электростатического поля, созданного распределением электронов с плотностью $\sum_j \Phi_j^* \Phi_j$.

Предположим далее, что в сумме по j в последнем члене левой части уравнений (10.10) удерживается лишь член с $j = i$. Очевидно, что этот член описывает потенциал, создаваемый рассматриваемым i -м электроном и вычитающийся из суммарного потенциала. Приближение, полученное таким образом, называется приближением Хартри; в § 5 и 9 мы применяли еще более грубый метод, а именно пренебрегали этой поправкой и считали, что на все частицы действует один и тот же потенциал. Естественно предположить, что такой метод будет давать хорошие результаты лишь в том случае, когда число электронов очень велико.

Поправка Хартри уменьшает на единицу суммарный заряд электронов при вычислении потенциала, действующего на рассматриваемый электрон. Разумеется, эта поправка весьма грубо аппроксимирует третий (обменный) член в левой части (10.10). С физической точки зрения поправка Хартри учитывает тот факт, что электрон не действует сам на себя, и потому полный заряд системы следует уменьшить на единицу. Поскольку этот заряд обычно локализован вблизи рассматриваемого электрона, поправка Хартри часто оказывается существенной.

Эффект „выкапывания“ электроном дырки вокруг себя будет более полно изучен в гл. 2. Подчеркнем, однако, что в том случае, когда в системе имеются в равном числе частицы со спинами „вверх“ и „вниз“, приведенные соображения несколько видоизменяются по сравнению с изученным выше случаем одинаково направленных спинов всех частиц. Подробное обсуждение физических аспектов затронутой проблемы (в дополнение к приведенным здесь кратким замечаниям) читатель может найти в статье Слэттера [188].

3. Среднее значение гамильтониана

В приведенное выше определение гамильтониана H_s [см. (10.8)] входят его собственные функции. Таким образом, для нахождения как H_s , так и его собственных функций следует применить итерационную процедуру. Сначала выбираются приближенные собственные функции, затем по ним находится гамильтониан, после чего вычисляются уточненные собственные функции и т. д. Процесс итераций, очевидно, нужно продолжать до тех пор, пока собственные функции не приведут к тому же самому гамильтониану, с помощью которого они были получены. На этом этапе будет достигнуто требуемое самосогласование.

Если известен самосогласованный гамильтониан, можно без труда найти полную энергию в приближении Хартри — Фока. Для вычисления среднего значения H по-прежнему применима формула (10.5), где следует лишь заменить функции Φ_i на Φ_i . Используя (10.8) и (10.9), находим

$$\begin{aligned} \langle \Phi_m | H | \Phi_m \rangle &= \frac{1}{2} \sum_i \langle i | H_s | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_i \langle i | U | i \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \{ \langle i | U | i \rangle + \epsilon_i \}. \end{aligned} \quad (10.11)$$

Разумеется, здесь H_s — гамильтониан Хартри — Фока; он снова понадобится нам в гл. 3.

§ 11. КВАЗИЧАСТИЦЫ И ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ. КАЧЕСТВЕННЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

До сих пор основное внимание уделялось вычислению одночастичных орбиталей, которые входят в детерминант, аппроксимирующий волновую функцию системы многих частиц. Выше излагались два метода самосогласованного потенциала, которые можно назвать симметризованной теорией Хартри и полной теорией Хартри — Фока.

Поскольку основной темой книги является исследование систем сильно взаимодействующих частиц, по-видимому, полезно уже здесь дать качественное описание иного подхода, в известном смысле родственного одночастичному. Правда, волновые функции в новом подходе уже нельзя адекватно представить в виде симметризованных или антисимметризованных произведений.

Хорошо известно, что энергетический спектр системы играет определяющую роль по отношению ко многим ее физическим свойствам. Низколежащим возбуждениям часто можно дать

удобную и четкую классификацию, в основе которой лежит весьма общий результат, не зависящий от статистики и не предполагающий обязательной малости взаимодействия между исходными („голыми“) частицами. Именно, гамильтониан системы можно представить в следующей форме:

$$H = E + H_{\text{кв. ч.}} + H_{\text{кв. ч. вз.}}, \quad (11.1)$$

где E — константа, оператор $H_{\text{кв. ч.}}$ описывает систему независимых „частиц“ с заданными импульсами и энергиями, а наличие $H_{\text{кв. ч. вз.}}$ соответствует слабому взаимодействию между этими „частицами“. Вообще говоря, независимые „частицы“, описываемые гамильтонианом $H_{\text{кв. ч.}}$, отличаются от исходных частиц; их называют квазичастицами (чему и соответствует индекс „кв. ч.“ в гамильтониане). Разумеется, необходимым условием того, чтобы описание в терминах независимых квазичастиц имело смысл (по крайней мере в первом приближении) является малость гамильтониана взаимодействия $H_{\text{кв. ч. вз.}}$.

Между квазичастицами и „голыми“ частицами имеются существенные отличия. Так, можно сразу отметить, что в противоположность исходной системе число квазичастиц не обязательно должно быть фиксированным; кроме того, статистика квазичастиц может отличаться от статистики „голых“ частиц.

В соответствии с тем, что число квазичастиц не сохраняется, можно сказать, что в основном состоянии квазичастицы вообще отсутствуют, а его энергия равна просто величине E в (11.1). Тогда мы можем описывать возбужденные состояния, основываясь на понятии элементарного возбуждения, если определить последнее как состояние, содержащее одну квазичастицу. Значения импульса и энергии такой квазичастицы, определяемые гамильтонианом $H_{\text{кв. ч.}}$, совпадают с полным импульсом и энергией возбуждения всей системы¹⁾. Пусть теперь имеются две квазичастицы с импульсами $\hbar k_1$ и $\hbar k_2$ и энергиями $\epsilon(k_1)$ и $\epsilon(k_2)$. Тогда полный импульс и энергия возбуждения системы равны соответственно $\hbar(k_1 + k_2)$ и $\epsilon(k_1) + \epsilon(k_2)$, поскольку гамильтонианом взаимодействия $H_{\text{кв. ч. вз.}}$ можно пренебречь. Могло бы показаться, что таким путем можно последовательно построить все возбужденные состояния системы многих частиц. Однако приведенное выше рассуждение теряет смысл, когда число квазичастиц велико. В этом случае наличие большого числа парных взаимодействий в конечном счете приводит (несмотря на малость $H_{\text{кв. ч. вз.}}$) к нарушению описанной простой картины. Наиболее важный для нас сейчас вывод состоит в том, что низколежащие

¹⁾ Мы имеем здесь в виду только однородные системы.

возбужденные состояния можно описать, указав квазичастицы, присутствующие в этих состояниях.

Различие в статистике „голых“ частиц и квазичастиц лучше всего пояснить на конкретных примерах. Как будет детально показано в гл. 5, однородный электронный газ (в котором „голые“ частицы, разумеется, являются фермионами) описывается с помощью элементарных возбуждений как бозе-типа (плазмоны), так и ферми-типа. Этот факт был установлен экспериментально за несколько лет до разработки соответствующих теоретических представлений. Кроме того, в гл. 8, где кратко рассматриваются упругие колебания кристаллического твердого тела, мы увидим, что возникающие в этом случае квазичастицы (хорошо известные фононы) подчиняются статистике Бозе. Следует отметить, что это утверждение справедливо даже в том случае, когда атомы или ионы, составляющие твердое тело, сами являются фермионами (что имеет место, например, в твердом He^3).

В заключение заметим, что одночастичные методы, развитые в этой главе, вполне применимы и для исследования свойств атомов и молекул, которое мы предпримем в гл. 2. Однако, как мы видели, в том случае, когда „независимые“ частицы не являются исходными „голыми“ частицами, условие сохранения их числа ослабляется. Эффективный учет этого обстоятельства достигается обычно с помощью формализма вторичного квантования, который будет развит в гл. 3.

ЗАДАЧИ

1.1. Получить выражение для плотности распределения электронов

$$\rho(r) = \sum_k \psi_k^* \psi_k$$

в первом порядке по потенциальной энергии $V(r)$, исходя из интегрального уравнения для волновой функции

$$\psi_k(r) = e^{ikr} - \frac{1}{2\pi} \int G(r, r') V(r') \psi_k(r') dr',$$

где функция Грина $G(r, r')$ для свободной частицы имеет вид

$$G(r, r') = \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}.$$

Показать, что решение имеет вид (9.1).

1.2. Волновое уравнение в случае связанных состояний можно записать также в интегральной форме

$$\psi(r) = -\frac{1}{2\pi} \int \frac{\exp(i\sqrt{2E}|r-r'|)}{|r-r'|} V(r') \psi(r') dr'.$$

Показать, что водородная волновая функция $\Psi = e^{-Zr}$ является решением этого уравнения для потенциала $V = -Z/r$ (энергия основного состояния $E = -Z^2/2$ в атомных единицах). Почему теория возмущений Рэля — Шредингера, в которой решением невозмущенной задачи служат плоские волны, приводит в данном случае к неверному результату?

1.3. Показать, что для системы N бесспиновых фермионов, заключенных в одномерный ящик длиной l и двигающихся вдоль оси x , плотность числа частиц дается выражением

$$\rho_0(x) = \frac{N + 1/2}{l} - \frac{\sin [\pi(2N + 1)x/l]}{2 \sin(\pi x/l)}.$$

Показать, что отсюда вытекает следующее выражение для матрицы плотности Дирака

$$\gamma_0(x', x) = \rho_0\left(\frac{x' + x}{2}\right) - \rho_0\left(\frac{x' - x}{2}\right).$$

1.4. Показать, что введенная в § 5 матрица плотности Дирака γ удовлетворяет условию $\gamma^2 = \gamma$ и является, следовательно, проекционным оператором. [В координатном представлении это означает, что выполняется соотношение

$$\int \gamma(r r') \gamma(r' r_0) d r' = \gamma(r r_0).]$$

1.5. Используя определение (6.5) функции G , преобразовать интегральное уравнение (7.3) к виду

$$G(r r_0 \epsilon) = G_0(r r_0 \epsilon) - \int d r_1 G_0(r r_1 \epsilon) V(r_1) G(r_1 r_0 \epsilon).$$

1.6. Показать, что для трехмерного изотропного гармонического осциллятора, обладающего потенциальной энергией $V(r) = m\omega^2 r^2/2$, диагональный элемент матрицы плотности Блоха имеет вид

$$C(r r \beta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} \left(\frac{\omega}{\sinh \hbar\omega\beta}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m}{\hbar} \omega r^2 \operatorname{th} \frac{1}{2} \hbar\omega\beta\right),$$

где

$$\beta = (k_B T)^{-1}.$$

Глава 2

АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой книге мы будем в основном рассматривать задачу многих тел для больших систем, занимающих объем Ω и состоящих из N частиц, причем число N столь велико, что можно перейти к пределу $N \rightarrow \infty$, $\Omega \rightarrow \infty$, сохранив конечное значение плотности N/Ω . Однако в настоящей главе будет получен ряд результатов для „малых“ систем, а именно для изолированных атомов и молекул.

Прежде всего остановимся вкратце на следствиях, вытекающих из одночастичных приближений гл. 1, в особенности относящихся к вычислению энергий связи атомов. Следует сразу отметить, что полное количественное изучение следствий теории Хартри — Фока представляет огромный интерес в атомной физике, и в настоящее время уже существуют исчерпывающие изложения соответствующих результатов [93, 96]. Поэтому мы ограничимся кратким обсуждением тех аспектов теории атома в одноэлектронном приближении, которые носят в лучшем случае полукаличественный характер, и перейдем затем к более детальному рассмотрению двухэлектронных систем — атома гелия и других двухэлектронных ионов, а также молекулы водорода. Это позволит нам ввести и наглядно представить ряд основных понятий, играющих важную роль при описании коррелированного движения взаимодействующих частиц в простейших системах.

Хотя мы не будем в дальнейшем заниматься молекулами, было сочтено целесообразным включить краткое описание корреляций в молекуле H_2 , так как понятие предела „сильной корреляции“ (или „сильной связи“) используется в гл. 5 при рассмотрении электронного газа в металлах.

§ 2. ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ АТОМЫ БЕЗ УЧЕТА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ЭЛЕКТРОНАМИ

Резюмируем кратко простые результаты для водородоподобного атома, который является прототипом для всех задач атомной теории, и подчеркнем качественные особенности этих результатов.

Хорошо известно, что собственные функции любой задачи с центральным полем сил (в том числе, следовательно, и задачи об атоме водорода) записываются следующим образом:

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi). \quad (2.1)$$

Здесь сферические гармоники $Y_l^m(\theta, \phi)$ являются одновременно собственными функциями оператора L^2 – квадрата орбитального момента количества движения – с собственными значениями $l(l+1)\hbar^2$ ($l = 0, 1, 2, \dots$) и оператора L_z – проекции этого момента на ось z (соответствующие собственные значения L_z равны $m\hbar$ ($-l \leq m \leq l$)). Если рассмотреть случай произвольного ядра с зарядом Ze , то ненормированные радиальные волновые функции такого водородоподобного атома можно записать в следующем виде:

$$R_{nl}(r) = e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho). \quad (2.2)$$

В правую часть (2.2) входят присоединенные функции Лагерра, у которых индексы n и l принимают значения $n = 1, 2, 3, \dots$ ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$), а $\rho = 2Zr/na_0$. Мы используем волновые функции (2.2) в § 4; однако сейчас важно отметить, что уровни энергии, соответствующие этим функциям, выражаются через главное квантовое число n :

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{e^2}{a_0}; \quad (2.3)$$

здесь $a_0 = \hbar^2/me^2$ – первый боровский радиус для водорода.

1. Энергия связи водородоподобных атомов

Рассмотрим, не вдаваясь в детали, модель атома, в которой Z электронов взаимодействуют только с ядром, а их взаимодействие между собой считается каким-либо образом „выключенным“. Предположим, кроме того, что электроны заполняют N замкнутых оболочек. Ясно, что полная энергия в этом случае представится в виде суммы одночастичных энергий, определяемых соотношением (2.3). Поскольку каждая оболочка, которой соответствует главное квантовое число n , содержит $2n^2$ частиц, из (2.3) следует, что вклад каждой оболочки в полную энергию составляет $-Z^2 e^2/a_0$. Таким образом, суммируя собственные значения (2.3) по N замкнутым оболочкам, получаем просто

$$\epsilon = -Z^2 N \frac{e^2}{a_0}. \quad (2.4)$$

Для нейтрального атома должно выполняться следующее соотношение между полным числом электронов Z и числом заполненных оболочек:

$$Z = \sum_{n=1}^N 2n^2 = \quad (2.5)$$

$$= \frac{N(N+1)(2N+1)}{3}. \quad (2.6)$$

Если предположить теперь, что число электронов Z (а вместе с ним и N) очень велико, то из (2.6) при $N \gg 1$ следует

$$N \sim \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} Z^{1/3}. \quad (2.7)$$

Пользуясь далее соотношением (2.4), мы находим зависимость полной энергии связи тяжелого атома от его атомного номера:

$$\epsilon = -\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} Z^{7/3} \frac{e^2}{a_0}. \quad (2.8)$$

Выражение (2.8) получено в предположении о применимости нерелятивистского волнового уравнения. Фактически, если атомный номер Z очень велик, то, как мы увидим в § 4 [ср. (4.7)] при вычислении распределения электронов по импульсам в атоме, внутренние электроны движутся с очень большими скоростями, так что становится необходимым использовать релятивистское волновое уравнение. Однако на протяжении большей части этой книги используется нерелятивистская теория; мы ограничимся установлением пределов применимости нашего рассмотрения, не вдаваясь подробно в точную теорию, основанную на уравнении Дирака.

В гл. 5 и 6 мы сопоставим ситуацию в случае электронного газа и ядерной материи с той, которая имеет место в атоме; в обоих указанных случаях будут получены выражения для энергии, которая оказывается прямо пропорциональной числу частиц в отличие от выражения для энергии связи тяжелого атома (2.8).

§ 3. ПРИБЛИЖЕННЫЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ТЯЖЕЛЫХ АТОМОВ

Для получения количественных результатов для атомов с большими атомными номерами следует модифицировать вывод, с помощью которого было получено выражение (2.8) для суммы собственных значений, поскольку при этом мы не учитывали взаимодействий между электронами. Чтобы показать, каким способом можно учесть эти взаимодействия в рамках

одночастичного подхода, воспользуемся развитой в гл. 1, § 9 приближенной теорией для вычисления матрицы плотности.

Точнее, мы хотим заменить кулоновскую потенциальную энергию $-Ze^2/r$ экранированным полем, которое можно записать в виде $V(r) = -Z(r)e^2/r$, причем $Z(r) \rightarrow Z$ при $r \rightarrow 0$ и $Z(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Применим для приближенного вычисления $Z(r)$ симметризованный метод Хартри (см. гл. 1), в котором принимается, что все электроны движутся в одном и том же потенциальном поле $V(r)$. В своей оригинальной работе, посвященной самосогласованному полю в атомах, Хартри учитывал, что электрон, движение которого мы рассматриваем, не действует сам на себя [симметризованный метод Хартри упускает это из виду, но в методе Хартри — Фока (см. гл. 1, § 10) учитывается действие электрона на самого себя]. Очевидно, с возрастанием номера Z допускаемый нами эффект действия электрона на самого себя становится все менее важным.

Если бы нам удалось затем просуммировать ряд теории возмущений для матрицы плотности (см. гл. 1, § 7) во всех порядках, мы получили бы функциональное выражение для плотности распределения электронов в атоме

$$\rho(r, E) = F(V(r), E). \quad (3.1)$$

К сожалению, как уже отмечалось в гл. 1, в настоящее время провести такое суммирование невозможно. Указанные трудности можно было бы обойти путем прямого численного расчета хартриевских волновых функций (см. [96]), но для наших целей достаточно воспользоваться приближенным результатом Томаса — Ферми, а именно заменить (с точностью до константы) функцию F в (3.1) выражением $[E - V(r)]^{1/2}$ для $E \geqslant V$ (при $E < V$ функция F равна нулю).

Условие самосогласования, рассмотренное в гл. 1, § 10, означает, что плотность заряда $\rho(r)$ должна быть связана с потенциалом $V(r)$ уравнением Пуассона

$$\nabla^2 V = -4\pi e^2 \rho(r), \quad (3.2)$$

где

$$\rho(r) = \begin{cases} \frac{8\pi}{3h^3} [2m(E_f - V)]^{1/2} & (E_f > V), \\ 0 & (E_f \leqslant V). \end{cases} \quad (3.3)$$

Если записать разность $E_f - V$ в виде

$$E_f - V = \frac{Ze^2}{r} \chi(x) \quad (r = bx), \quad (3.4)$$

где

$$b = \left(\frac{3}{32\pi^2} \right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{2me^2 Z^{1/3}} = \frac{0,88534}{Z^{1/3}} a_0,$$

то очевидно, что x и χ представляют собой безразмерные переменные, связанные в силу (3.2) – (3.4) нелинейным уравнением

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{x^{1/2}}; \quad (3.5)$$

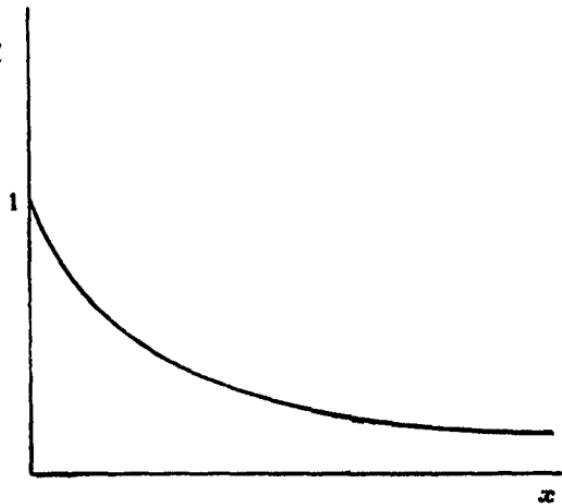
в случае нейтральных атомов искомое решение $\chi(x)$ должно удовлетворять граничным условиям

$$\chi(0) = 1, \quad \chi(\infty) = 0. \quad (3.6)$$

Используя уравнение (3.5), легко показать, что решение $\chi(x)$, стремящееся на бесконечности к нулю, ведет себя асимптотически следующим образом:

$$\chi(x) \sim 144x^{-3}, \quad (3.7)$$

однако для произвольных значений x решение следует находить численно. В работе Гомбаша [84] приведена полезная



Фиг. 1 Решение $\chi(x)$ безразмерного уравнения Томаса – Ферми (3.5) с граничным условием (3.6).

таблица значений функции χ ; общий вид этой функции указан на фиг. 1. Для грубых оценок иногда полезно воспользоваться приближенным аналитическим решением уравнения (3.5), найденным Зоммерфельдом [190] на основе асимптотического выражения (3.7). Это решение имеет вид

$$\chi = \left\{ 1 + \left(\frac{x}{a} \right)^d \right\}^{-c}, \quad (3.8)$$

где $a = 12^{1/3}$, $d = 0,772$, $c = 3/d = 3,886$. Основной недостаток решения (3.8) состоит в том, что производная $d\chi/dx$ обращается в бесконечность при $x = 0$ [ср. ниже (3.13)].

Важно отметить, что теперь, согласно (3.4), кулоновское поле экранируется, и соответственно уменьшается полная энергия связи ϵ электронов в атоме. Фактически в случае любого экранированного поля, определяемого соотношением типа (3.4), можно вычислить сумму собственных значений $\epsilon_{\text{сумм}}$ и получить результат, аналогичный случаю кулоновского поля (2.8). Приближение Томаса — Ферми для $\epsilon_{\text{сумм}}$ получится, если заметить, что средняя потенциальная энергия, соответствующая одноэлектронной волновой функции Φ_i , равна $\int \Phi_i^* V \Phi_i d\mathbf{r}$; тогда, суммируя по всем i вплоть до уровня Ферми, получим, очевидно, $\int \rho(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$. К этому выражению следует добавить кинетическую энергию, которую в данной модели можно найти, например, вычисляя интеграл

$$\int -\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^2 \gamma(r'r)]_{r'=r} d\mathbf{r}$$

с помощью теории возмущений для матрицы плотности (гл. 1, § 7) в полной аналогии с вычислением для плотности $\rho(\mathbf{r})$. Выражение для кинетической энергии можно получить и более простым способом, заметив, что, согласно формулам (1.3.7)¹⁾ и (1.3.8), кинетическая энергия на единицу объема для свободных электронов пропорциональна плотности в степени $5/3$. Отсюда почти непосредственно получаем

$$\epsilon_{\text{сумм}} = \frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{1/3} \int \rho^{5/3} d\mathbf{r} + \int \rho V d\mathbf{r}. \quad (3.9)$$

В случае потенциала Томаса — Ферми, определяемого уравнениями (3.4) и (3.5), выражение (3.9) принимает вид

$$\epsilon_{\text{сумм}} = -0,5125 Z^{7/3} \frac{e^2}{a_0}. \quad (3.10)$$

Однако $\epsilon_{\text{сумм}}$ в (3.10) не является еще энергией связи, так как в сумме собственных значений, соответствующей хартриевскому члену, взаимодействия между электронами учтены дважды. Внося соответствующую поправку в (3.9), находим окончательно

$$\epsilon_{\text{энер. св}} = -0,7687 Z^{7/3} \frac{e^2}{a_0}, \quad (3.11)$$

¹⁾ Здесь и в дальнейшем при ссылках на формулы, находящиеся не в той главе, где они упоминаются, используется тройная нумерация, первая цифра означает номер главы. — Прим. ред.

тогда как, согласно (2.8), энергия связи составляет $-1,2Z^{7/5}e^2/a_0$. Отсюда видно, что введение самосогласованного поля не меняет качественной картины, но играет важную роль для уточнения количественных результатов теории.

Продолжая рассуждения дальше, можно показать, что потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядром (которую мы обозначим U_{eN}) просто связана с потенциальной энергией взаимодействия между электронами. Объединяя этот результат с теоремой вириала для системы, находящейся в равновесии под действием только кулоновских сил:

$$2 \cdot (\text{кинетическая энергия}) + (\text{потенциальная энергия}) = 0, \quad (3.12)$$

находим простое соотношение между энергией связи $\epsilon_{\text{св}}$ и потенциальной энергией взаимодействия U_{eN} :

$$\epsilon_{\text{св}} = \frac{3}{7} U_{eN}. \quad (3.13)$$

Очевидно, что U_{eN} в (3.13) совпадает с произведением заряда ядра Ze на потенциал $V_e(0)$, созданный электронным облаком на ядре.

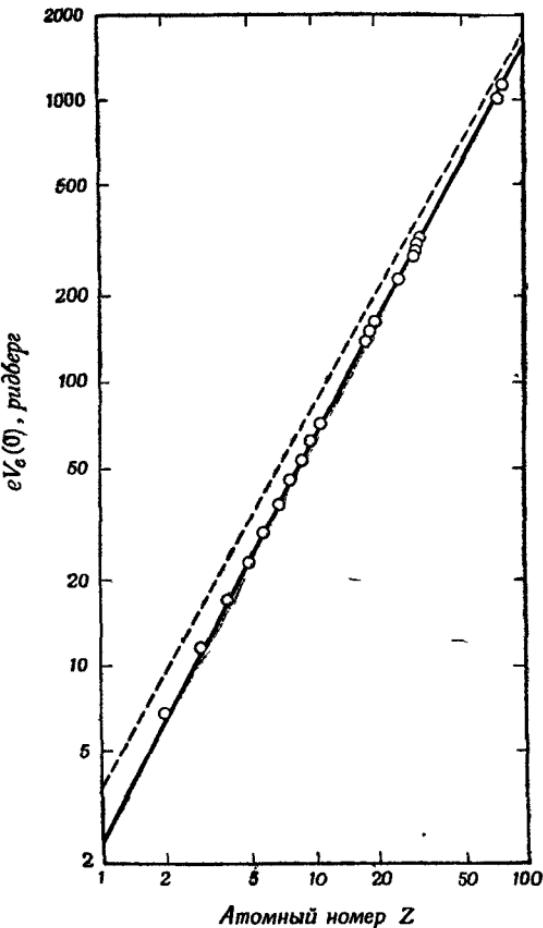
1. Результаты Хартри для потенциала, созданного электронным облаком на ядре

На фиг. 2 представлены результаты для $V_e(0)$, полученные как в модели Томаса — Ферми, так и с помощью вычислений по методу Хартри [52]. Видно, что точки, найденные методом Хартри для атомов от Не до Hg, с замечательной точностью укладываются на прямую линию, уравнение которой имеет вид

$$eV_e(0) = \left(\frac{6}{5}\right) Z^{7/5} \frac{e^2}{a_0}. \quad (3.14)$$

Применив полукачественные рассуждения, основанные на теореме Фейнмана [63], Фолди [67] показал, каким образом можно использовать соотношение (3.14) для получения энергий связи атомов по Хартри. Мы не будем приводить здесь подробного изложения этих рассуждений, так как их основные моменты можно понять, базируясь на уравнениях (3.13) и (3.14). Именно, для тяжелых атомов энергия связи должна быть пропорциональна $Z^{12/5}$, поскольку энергия U_{eN} в (3.13) пропорциональна $ZV_e(0)$, а $V_e(0) \sim Z^{7/5}$ в силу (3.14). Вычисления Фолди дают, таким образом, для показателя степени у Z значение 2,40, тогда как в теории Томаса — Ферми был ранее получен показатель $7/3 = 2,33$. Можно считать, что в этом отношении между

двумя теориями имеется хорошее согласие, однако существующие различия, несомненно, маскируются в экспериментах реля-



Фиг. 2. Потенциал на ядре атома, созданный электронным облаком. Пунктирная линия — результат Томаса — Ферми; сплошная линия — результат, полученный с помощью уравнения (3.14); кружки — вычисления по методу Хартри.

тивистскими эффектами, которые по грубым оценкам увеличивают энергию связи [186]:

$$\epsilon_{\text{релят}} - \epsilon_{\text{нерелят}} \sim 4 \cdot 10^{-6} Z^{9/2} \frac{e^2}{a_0}. \quad (3.15)$$

Изучив качественно вид волновых функций в координатном пространстве и энергии связи атомов, рассмотрим теперь кратко волновые функции в импульсном пространстве.

§ 4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПО ИМПУЛЬСАМ В АТОМЕ

Если в координатном пространстве волновая функция $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ для атома с N электронами задана, то импульсную волновую функцию можно получить с помощью преобразования Фурье

$$\chi(p_1, p_2, \dots, p_N) = \frac{1}{(2\pi)^{3N/2}} \int \exp\{-i(p_1 \cdot r_1 + \dots + p_N \cdot r_N)\} \times \\ \times \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) dr_1 dr_2 \dots dr_N. \quad (4.1)$$

Распределение по импульсам имеет очень важное физическое значение, в особенности в задачах со многими электронами, поэтому полезно дать здесь краткий элементарный анализ такого распределения в атомах.

Рассмотрим простейший случай, а именно основное состояние водородоподобного атома с зарядом ядра Z . В силу (2.1) и (2.2) нормированная волновая функция $\psi_{100}(r)$ в системе единиц, где $a_0 = 1$, имеет вид

$$\psi_{100}(r) = \left(\frac{Z^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-Zr}. \quad (4.2)$$

Применяя к функции (4.2) преобразование Фурье и используя соотношение

$$\int e^{-ar+i(p \cdot r)} dr = \frac{8\pi a}{(p^2 + a^2)^2}, \quad (4.3)$$

получаем для волновой функции в импульсном пространстве выражение

$$\chi(p) = \frac{(8Z^5)^{1/2}}{\pi(p^2 + Z^2)^2}. \quad (4.4)$$

Очевидно, что вероятность найти электрон, импульс которого лежит между p и $p + dp$, определяется выражением

$$I(p) dp = |\chi(p)|^2 4\pi p^2 dp = \quad (4.5)$$

$$= \frac{32p^2 Z^5}{\pi(p^2 + Z^2)^4}. \quad (4.6)$$

Для среднего значения импульса имеем

$$\bar{p} = \int_0^\infty p I(p) dp = \frac{8Z}{3\pi}. \quad (4.7)$$

Для общего случая импульсные волновые функции водородоподобного атома были впервые вычислены в работе [159], где показано, в частности, что эти функции обладают такой же угловой зависимостью, как и пространственные.

Мы вернемся к функции распределения по импульсам $I(p)$ в § 7, где будет установлена связь с бесспиновой матрицей плотности первого порядка $\gamma(\mathbf{r}\mathbf{r}')$; сейчас мы обратимся к выяснению роли корреляций между электронами.

§ 5. ФЕРМИЕВСКИЕ И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ДЫРКИ В АТОМАХ

До сих пор мы не учитывали корреляций между частицами, возникающих при движении электронов благодаря кулоновскому отталкиванию между ними. Метод самосогласованного поля, несомненно, учитывает эти корреляции в среднем, однако мы должны рассмотреть теперь коррелированное движение частиц.

Правда, с известным основанием можно утверждать, что задача об атоме едва ли относится к числу проблем многих частиц (ср. вводные замечания к § 1). Тем не менее уже в случае легких атомов обнаруживается ряд характерных черт, с которыми мы будем часто встречаться в общей теории многих частиц, поэтому некоторые основные понятия можно ввести уже сейчас.

1. Фермиевская дырка

Как подчеркивалось в гл. 1, полная волновая функция Φ произвольной системы фермионов должна быть антисимметричной по отношению к одновременной перестановке пространственных и спиновых координат любой пары частиц. В качестве простейшего примера укажем на волновую функцию Φ_0 , служащую отправным пунктом при изучении основного состояния атома гелия:

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2) = \phi_0(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)[\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1)]; \quad (5.1)$$

здесь пространственная волновая функция $\phi_0(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)$ должна быть симметричной. Самое простое приближение для ϕ_0 получается, если составить произведение водородоподобных $1s$ -функций (4.2) и положить эффективный заряд ядра равным, например, Z' .

Тогда функция ϕ_0 запишется в виде

$$\phi_0(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2) = \frac{Z'^3}{\pi} e^{-Z'r_1} e^{-Z'r_2}, \quad (5.2)$$

где требуемая симметрия налицо. Очевидно, что мультиплексивная волновая функция (5.2) отвечает полному отсутствию корреляций между электронами.

С другой стороны, образуем волновую функцию Ψ_1 для возбужденного состояния атома гелия, в котором спины обоих электронов параллельны. Можно записать Ψ_1 в виде

$$\Psi_1(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2) = \psi_1(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2) \alpha(1) \alpha(2), \quad (5.3)$$

где \mathbf{x} обозначает совокупность пространственной и спиновой координат, однако в отличие от (5.1) пространственная волновая функция ψ_1 должна быть антисимметричной. Этого можно добиться, составив антисимметризованное произведение пространственных волновых функций $1s$ - и $2s$ -состояний

$$\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1s}(\mathbf{r}_1) \psi_{2s}(\mathbf{r}_2) - \psi_{1s}(\mathbf{r}_2) \psi_{2s}(\mathbf{r}_1) \quad (5.4)$$

Но теперь мы видим, что, например, вероятность одновременного нахождения электрона 1 и электрона 2 в точке \mathbf{r}_1 [пропорциональная, очевидно, $\{\|\psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\|^2\}_{\mathbf{r}_2=\mathbf{r}_1}$] тождественно равна нулю в силу (5.4), тогда как функция (5.2) дает в этом случае отличный от нуля результат.

Хотя указанный результат получен элементарным и нестрогим путем, он является совершенно общим следствием требования антисимметрии многочастичной волновой функции фермионов. Именно, вероятность обнаружить в одной точке пространства два фермиона с параллельными спинами равна нулю. Другими словами, независимо от наличия взаимодействий ферми-частица „выкапывает“ вокруг себя „дырку“, если понимать под дыркой область пространства, характеризующуюся недостатком частиц с параллельными спинами. В этом состоит так называемый эффект ферми-дырки; он, очевидно, имеет место уже в „орбитальной“, или одноэлектронной, теории, если речь идет об электронах с параллельными спинами.

Пользуясь представлениями, развитыми в гл. 1, можно было бы сказать, что диагональный элемент двухчастичной матрицы плотности для частиц с параллельными спинами равен нулю, когда равно нулю расстояние между этими частицами; при этом обращается в нуль также и парная корреляционная функция.

Данное обстоятельство является благоприятным, ибо оно означает, что даже если пренебречь (в одночастичном приближении) корреляциями, возникающими вследствие кулоновского отталкивания, то сближению электронов с параллельными спинами воспрепятствуют их статистические свойства. Указанный эффект отсутствует в системе электронов с антипараллельными спинами (например, в случае основного состояния атома гелия). Поэтому перейдем к обсуждению понятия корреляционной дырки.

2. Корреляционная дырка

Ввиду того что электроны отталкивают друг друга, вероятность найти две частицы с антипараллельными спинами на больших удалениях друг от друга больше, чем на малых. Это свойство оказалось утерянным в выражениях (5.1) и (5.2) для

приближенной волновой функции основного состояния, и, для того чтобы учесть эту корреляцию, мы должны уточнить вычисления.

Подойдем к этой задаче с несколько иной стороны. Обозначим через r_{12} расстояние между электронами, находящимися в основном состоянии; тогда, вводя в некоррелированную волновую функцию отталкивание между электронами, можно ожидать, что среднее значение $\langle r_{12} \rangle$ увеличится. Остановимся подробнее на том, как происходит указанное увеличение.

Введем функцию распределения $f(r_{12})$ и нормируем ее так, что

$$\int_0^\infty f(r_{12}) dr_{12} = 1. \quad (5.5)$$

Чтобы с помощью функции $f(r_{12})$ непосредственно представить влияние корреляций, вычислим ее двумя способами: с помощью точных волновых функций, учитывающих корреляцию, и с помощью наилучшей волновой функции, вообще не учитывающей корреляций — волновой функции Хартри—Фока. Разность между значениями f , полученными с использованием точной и хартрифоковской волновых функций, дает удобное описание корреляционной дырки.

a) *Распределение значений r_{12} в атоме гелия.* Для простейшей двухэлектронной задачи — атома гелия — легко показать, что пространственная волновая функция $\Phi_0(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)$ в (5.1) зависит только от расстояний r_1 и r_2 между ядром и электронами 1 и 2, а также от расстояния r_{12} между электронами. Тогда

$$f(r_{12}) dr_{12} = \int \Phi_0^2(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (5.6)$$

где интегрирование ведется по всем положениям обоих электронов при условии, что расстояние между ними лежит в интервале от r_{12} до $r_{12} + dr_{12}$.

Для примера возьмем сначала простую некоррелированную функцию Φ_0 (5.2). Тогда для $f(r_{12})$ получаем выражение

$$f(x) = \frac{Z'^3}{6} (3x^2 + 6Z'x^3 + 4Z'^2x^4) e^{-2Z'x}. \quad (5.7)$$

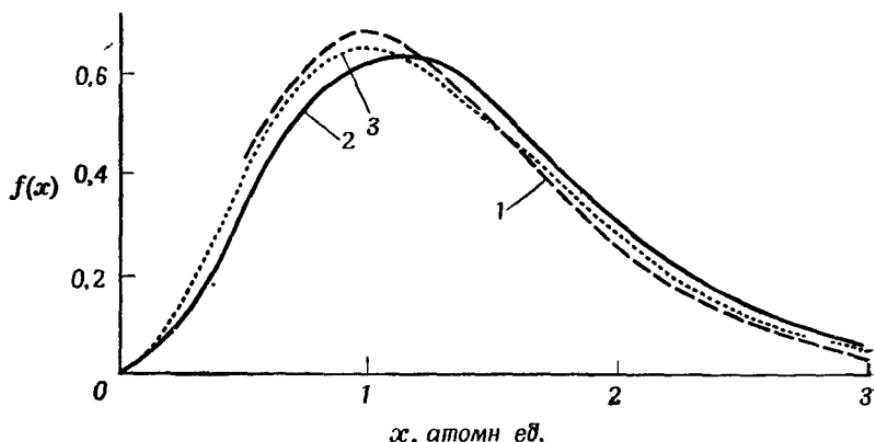
Зависимость (5.7) изображена на фиг. 3 для „наилучшего“ значения $Z' = 2 - 5/16 = 27/16$; там же приведена функция $f(x)$, найденная Коулсоном и Нейлсоном [49] с помощью пространственной волновой функции Хиллерааса

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) = \sum C_{lmn} (r_1 + r_2)^l (r_1 - r_2)^{2m} r_{12}^n e^{-Z'(r_1 + r_2)} \quad (5.8)$$

при учете шести членов, коэффициенты которых определялись вариационным методом. Фактически волновая функция (5.8)

дает точный результат для $f(x)$, во всяком случае с той точностью, которая возможна при графическом воспроизведении. Мы увидим ниже, что функция распределения заметно уширяется, и среднее значение $\langle r_{12} \rangle$ (измеренное в атомных единицах) возрастает от 1,296 до 1,420.

Соответствующее изменение среднего значения энергии отталкивания между электронами $\langle 1/r_{12} \rangle$ составляет 0,11 в атомных единицах (от 1,055 до 0,946), или 3 эв. Это весьма существенное уменьшение; правда, оно приводит к возрастанию



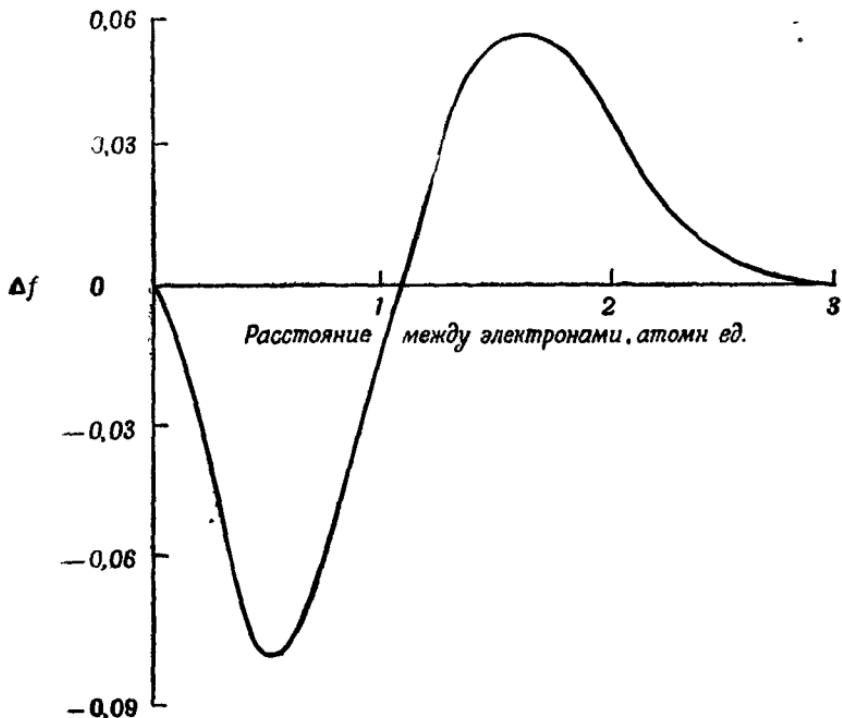
Фиг. 3 Функция распределения $f(x)$ для основного состояния атома гелия: 1 — результат, полученный с помощью выражения (5.7), 2 — «точный» результат, найденный с волновой функцией Хиллерааса (5.8), 3 — самосогласованный результат, полученный с помощью аналитической волновой функции Рутхана и др. [175].

кинетической энергии, но, согласно теореме вириала (3.12), изменение полной энергии равно лишь половине изменения потенциальной энергии. В этом состоит общее следствие наличия корреляций при движении электронов: потери в кинетической энергии частично возмещаются за счет увеличения потенциальной энергии.

Для корреляционной дырки, т. е. разности $\Delta f = f_{\text{точн}} - f_{\text{ХФ}}$ как функции расстояния между электронами, получается кривая, изображенная на фиг. 4; она показывает, что вероятность найти два электрона в атоме Не на расстоянии порядка 1 (в атомных единицах) друг от друга меньше, чем в случае отсутствия корреляции; соответственно возрастает вероятность того, что расстояние между электронами превышает величину порядка a_0 . Если, следуя Коулсону и Нейлсону [49], принять радиус порядка a_0 в качестве грубой оценки размеров корреляционной

дырки (Коулсон и Нейлсон называют ее кулоновской дыркой), то переносимый ею полный заряд составит $\sim \frac{1}{20}$ заряда электрона. Наоборот, заряд фермиевской дырки, как показано в гл. 5, в точности соответствует заряду электрона, и в этом ее резкое отличие от корреляционной дырки.

б) *Корреляционные дырки для других двухэлектронных ионов.* Вычисление волновых функций с той же точностью,

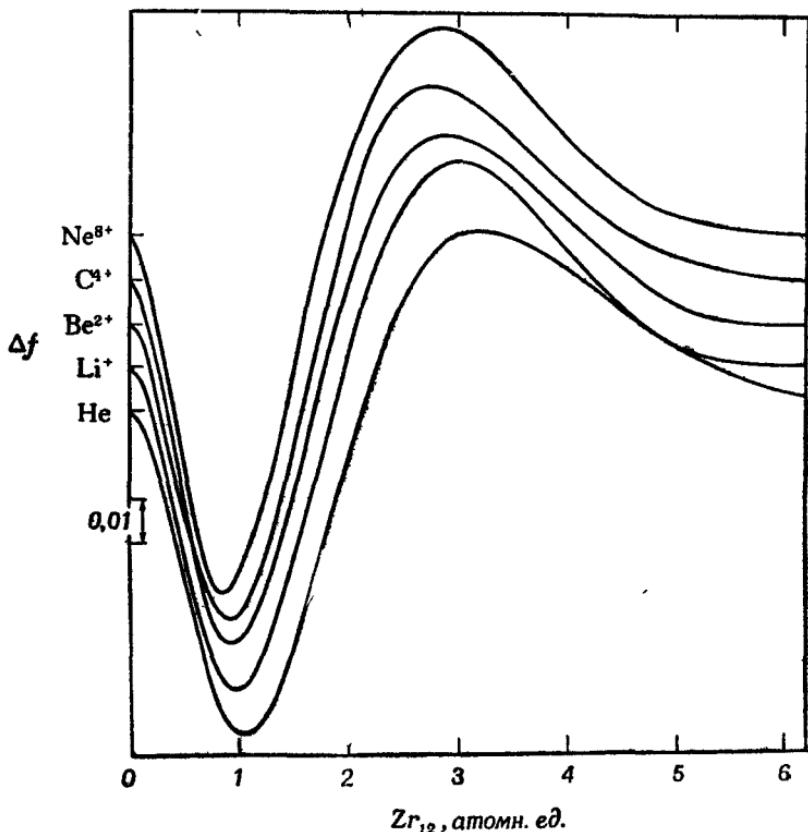


Фиг. 4. Корреляционная дырка $\Delta f = f_{\text{точн}} - f_{X\Phi}$.

с какой получена функция (5.8), является весьма трудоемким. Одна из целей подобных исследований должна состоять в нахождении характерных свойств, связанных с кулоновскими корреляциями в атомах и ионах.

В связи с этим интересно отметить, что форма корреляционной дырки сохраняет замечательное постоянство в пределах всего изоэлектронного ряда $\text{He}, \text{Li}^+, \dots, \text{Ne}^{8+}$. Действительно, изображая Δf как функцию Zr_{12} (где Z – атомный номер), мы замечаем, что соответствующие кривые мало меняются с изменением Z , сохраняя, как видно из фиг. 5, почти одинаковую форму [125].

Ясно, что в случае электронов с параллельными спинами следует рассматривать одновременно фермиевские и корреляционные дырки; некоторые вычисления проведены для атома Ne в работе [146], где читатель может найти дальнейшие детали.



Фиг. 5. Корреляционные дырки для изоэлектронной последовательности He, Li⁺, ... Ne⁸⁺.

В действительности в системах взаимодействующих частиц вообще невозможно совершенно четко разделить динамические и статистические эффекты.

Резюмируем наше очень краткое рассмотрение двухэлектронных систем. Мы видели, что относительно малые изменения (порядка 10%) расстояния между электронами легко могут привести к приращениям энергии 1 эв. Отсюда ясно, что если мы хотим с помощью теории получить значения энергий, которые можно было бы сравнить с экспериментом, то аккуратный учет кулоновского отталкивания становится существен-

ным. К счастью, двум электронам с параллельными спинами запрещено находиться на очень близком расстоянии друг от друга уже в силу принципа Паули (или, точнее, требования антисимметрии).

§ 6. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОДНОЧАСТИЧНОЙ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ ДЛЯ ИЗОЭЛЕКТРОННЫХ ГЕЛИОПОДОБНЫХ ИОНОВ ПО ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Результаты, приведенные в § 5, п. 2 для гелия и других двухэлектронных ионов, были получены вариационным методом. Как установил Шварц [184], существует интересная возможность вычислять плотность распределения электронов в атоме с помощью теории возмущений, не зная волновую функцию. Холл, Джонс и Рис [91] недавно обобщили этот результат и получили недиагональный элемент бесспиновой одночастичной матрицы плотности, определенной в гл. 1, § 4, п. 1. Кратко рассмотрим теперь эти вычисления для случая основного состояния ряда изоэлектронных гелиоподобных ионов; за подробностями читателю следует обратиться к оригинальным работам.

Фактически идея вычислений состоит в разбиении гамильтонiana на сумму одноэлектронных членов, имеющих вид (для каждого электрона)

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 - \left(\frac{Z - \alpha}{r} \right), \quad (6.1)$$

и оператора возмущения, который, очевидно, записывается следующим образом:

$$\frac{1}{r_{12}} - \frac{\alpha}{r_1} - \frac{\alpha}{r_2}. \quad (6.2)$$

Ясно, что α играет здесь роль константы экранирования (которая будет выбрана ниже); с помощью преобразования масштаба легко показать, что если гамильтониан (6.1) определяет невозмущенную задачу, то параметром разложения служит $(Z - \alpha)^{-1}$ — обратная величина эффективного заряда ядра. Волновая функция для суммы одноэлектронных гамильтонианов вида (6.1) дается просто выражением (5.2), где $Z' = Z - \alpha$; отсюда можно сразу получить нулевое приближение для матрицы плотности

$$\gamma_0(\mathbf{r}'\mathbf{r}) = \frac{(Z - \alpha)^3}{\pi} \exp \{-(Z - \alpha)(r' + r)\}. \quad (6.3)$$

Возмущение (6.2), как показано ниже, можно учесть, представив матрицу плотности в следующем виде:

$$\gamma_1(\mathbf{r}'\mathbf{r}) = \gamma_0(\mathbf{r}'\mathbf{r}) [F(r') + F(r) - 2\langle F \rangle]. \quad (6.4)$$

Функцию $F(r)$ можно найти, обобщив теорию возмущений для волновых функций, развитую в гл. 1, § 8. Полагая $y = (Z - a)r$, получаем для $F(r)$ следующий результат:

$$(Z - a)F(r) = \frac{1}{8}(-8a + 5)y - \frac{1}{8} - \frac{1}{4}e^{-2y} - \frac{3}{16} \frac{(e^{-2y} - 1)}{y} + \frac{3}{8} \int_0^y \frac{e^{-2x} - 1}{x} dx. \quad (6.5)$$

Легко видеть, что константа $\langle F \rangle$, входящая в (6.4), записывается следующим образом:

$$\langle F \rangle = \frac{-24a + 15}{16(Z - a)} - \frac{11}{32(Z - a)} - \frac{3}{8(Z - a)} \ln 2. \quad (6.6)$$

Этот результат является обобщением вычисленной Шварцем [184] электронной плотности на случай основного состояния ионов изоэлектронного гелиоподобного ряда.

Константа экранирования a до сих пор не была определена. Согласно Холлу [90], „наилучшее“ значение для a достигается, если при вычислении среднего значения любого одноэлектронного оператора с помощью матрицы плотности (6.4) потребовать стационарности этого среднего значения по отношению к вариациям a . При таком выборе a член первого порядка заведомо не дает вклада в среднее значение. Указанное значение a , вообще говоря, не совпадает с тем, при котором энергия минимальна (см. задачу 2.5).

Теперь, после того как приведены основные результаты вычислений для матрицы плотности [выражения (6.3) и (6.4)], рассмотрим кратко основные причины, которые позволяют получить результат в замкнутой форме, несмотря на наличие в возмущении (6.2) межэлектронного взаимодействия r_{12}^{-1} . Без существенного ущерба для общности ограничимся случаем $a = 0$ и рассмотрим следующее разложение волновой функции:

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_1 + \dots, \quad (6.7)$$

где функция Φ_0 определяется выражением (5.2) с $Z' = Z$. Одноэлектронную плотность $\rho(r_1)$ можно получить, интегрируя Φ по аргументу r_2 (см. также задачу 2.1); очевидно, в первом порядке это дает

$$\rho(r_1) = \int \Phi_0^2(r_1 r_2) dr_2 + 2 \int \Phi_0(r_1 r_2) \Phi_1(r_1 r_2) dr_2. \quad (6.8)$$

Согласно теории возмущений Рэлея – Шредингера (см. гл. 1, § 8, п. 4), можно записать

$$\Phi_1(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) = \sum'_n |n\rangle \frac{\langle n | 1/r_{12} | 0 \rangle}{E_0 - E_n}; \quad (6.9)$$

здесь $|n\rangle$ — симметричные водородные состояния системы двух электронов, позволяющие образовать основное (синглетное) состояние такой системы.

Решающее звено рассуждений Шварца [184] состоит в том, что ввиду наличия в (6.8) интегрирования по \mathbf{r}_2 , вклад в Φ_1 дают лишь те произведения одноэлектронных волновых функций в (6.9), которые содержат хотя бы один электрон в $1s$ -состоянии. Тогда можно видеть, что входящий в (6.9) матричный элемент $\langle n | 1/r_{12} | 0 \rangle$ (из числа дающих вклад в ρ) имеет вид

$$\int \Phi_{1s}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \Phi_{1s}(r_2) d\mathbf{r}_2 = \frac{1}{r_1} [1 - e^{-2r_1} (1 + r_1)]. \quad (6.10)$$

Этот результат фактически позволяет свести исходную задачу к проблеме изменения s -состояний под влиянием возмущающего потенциала (6.10). Таким образом, матричная форма (6.9) эквивалентна известному в теории возмущений одномерному дифференциальному уравнению, которое (ср. [207]) всегда решается в квадратурах. В этом состоит основная причина того, что для $F(r)$ можно получить точный результат (6.5).

Помимо вычисления средних значений, точный результат (6.5), как показал Шварц, может быть использован для проверки свойств приближенной волновой функции (5.8), входившей в вариационные расчеты Хиллерааса.

Ясно, что данный метод находится лишь в начальной стадии развития, к тому же случай атома гелия, разумеется, исключительно прост. Обобщение этого метода для получения разложения двухчастичной матрицы плотности в случае атомных систем более общего вида представляло бы большой интерес.

§ 7. КОРРЕЛЯЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В МОЛЕКУЛЕ ВОДОРОДА

В заключение настоящей главы рассмотрим кратко эффекты корреляции электронов в простейшей молекуле H_2 . Эта проблема служила пробным камнем для всех приближенных теорий, но в конечном счете единственными действительно точные волновые функции были получены вариационным методом с использованием пробных функций сложного вида, явным образом зависящих от расстояния между электронами r_{12} . Рассмотрим несколько подробнее результаты, полученные

с помощью одной из таких волновых функций, найденных Джеймсом и Кулиджем [105].

Подчеркнем прежде всего, что полную волновую функцию можно начать строить либо исходя из атомных орбиталей, локализованных вблизи соответствующих ядер, либо из молекулярных орбиталей, размазанных по всей молекуле. Первый подход, примером которого может служить работа Гайтлера и Лондона, пригоден в тех случаях, когда радиусы атомных орбит очень малы по сравнению с действительным расстоянием между ядрами. Второй подход, основанный на использовании молекулярных орбиталей, пригоден для системы с большим перекрытием атомных волновых функций. В теории молекулы водорода (как, впрочем, и во многих задачах молекулярной физики и физики твердого тела) ситуация является промежуточной между этими двумя предельными случаями. Однако ниже мы увидим, что для ряда свойств два столь различных подхода дают весьма сходные окончательные результаты.

Запишем приближенную волновую функцию основного состояния в методе Гайтлера — Лондона через одинаковые водородоподобные $1s$ -функции. Тогда, используя очевидные обозначения (a и b — индексы, относящиеся к ядрам), имеем

$$\Psi_{HL}(\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2) = [\psi_a(1) \psi_b(2) + \psi_a(2) \psi_b(1)] [\alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1)], \quad (7.1)$$

где

$$\psi(r) = \frac{Z^{1/2} e^{-Zr}}{\pi^{1/2}}.$$

С другой стороны, волновая функция в методе молекулярных орбиталей принимает вид

$$\Psi_{m0}(\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2) = [\psi_a(1) + \psi_b(1)] [\psi_a(2) + \psi_b(2)] [\alpha(1) \beta(2) - \alpha(2) \beta(1)], \quad (7.2)$$

где мы сделали дальнейшее упрощение, а именно приняли, что молекулярные орбитали являются линейными комбинациями атомных орбиталей.

Хотя обе функции — как (7.1), так и (7.2) — получены в очень грубых приближениях и в настоящее время не могут слишком серьезно приниматься в расчет, они демонстрируют одно важное свойство. Выполняя умножение в (7.2), мы видим, что функция Ψ_{m0} содержит члены типа Гайтлера — Лондона; но, кроме того, в нее входят члены типа $\psi_a(1) \psi_a(2)$ и $\psi_b(1) \psi_b(2)$. Эти члены, очевидно, описывают ситуации, когда оба электрона можно обнаружить одновременно соответственно вблизи ядра a или b . Совершенно ясно, что при больших расстояниях между ядрами такое расположение очень невыгодно энергетически из-за наличия кулоновского отталкивания.

Вообще можно сказать, что метод Гайтлера — Лондона переоценивает влияние электронных корреляций, и потому естественно назвать его приближением «сильной связи», тогда как метод молекулярных орбиталей вообще не учитывает корреляции между электронами с антипараллельными спинами. Эти соображения будут играть важную роль в гл. 5, когда мы перейдем к изучению поведения электронного газа в металле как функции плотности этого газа.

В заключение резюмируем кратко основные результаты для трех представляющих физический интерес величин, характеризующих молекулу H_2 : плотности распределения заряда (ее можно сопоставлять с результатами по рассеянию рентгеновских лучей), плотности распределения электронов по импульсам (эта величина определяет, например, форму модифицированной линии Комптона) и корреляций или, что то же (см. § 5, п. 2), для распределения вероятности значений расстояния r_{12} между электронами.

1. Плотность распределения заряда в молекуле H_2

Плотность распределения заряда $\rho(r)$ выражается через пространственную часть $\Psi(r_1 r_2)$ волновой функции следующим образом:

$$\rho(r_1) = \int |\Psi(r_1 r_2)|^2 dr_2. \quad (7.3)$$

Ввиду того, что плотность $\rho(r_1)$ обладает аксиальной симметрией, ее можно разложить в ряд по полиномам Лежандра:

$$\rho(r) = \sum \rho_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (7.4)$$

Ограничимся изучением слагаемого $\rho_0(r)$ — плотности заряда, усредненной по углам с вершиной в средней точке водородной связи; угол θ в (7.4) измеряет отклонение вектора r от этой линии.

На фиг. 6 изображена зависимость $\rho_0(r)$, получающаяся при использовании различных волновых функций.

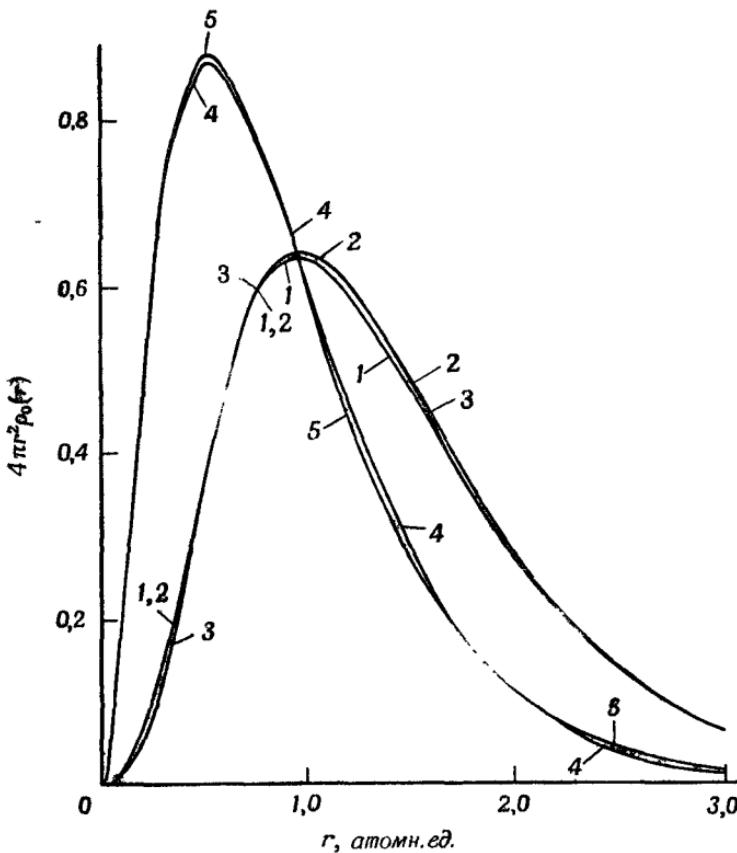
Кривая 1. Точная волновая функция, найденная вариационным методом Джеймсом и Кулиджем [105].

Кривая 2. Самосогласованная волновая функция [48].

Кривая 3. Волновая функция Гайтлера — Лондона вида (7.1), в которой 1s-орбиталям разрешено „уплывать“ от протонов [89]. Несколько неожиданно оказывается, что эта функция приводит к хорошему результату для энергии связи ($\sim 4,2$ эв; экспериментальное значение 4,7 эв).

Мы хотим подчеркнуть здесь следующие обстоятельства:

а) Все три функции приводят к очень существенному возрастанию (примерно в $3/2$ раза) плотности заряда в центре водородной связи по сравнению со случаем суперпозиции атомных орбиталей. Разумеется, именно поэтому все три метода



Фиг. 6. Усредненное по углам распределение заряда $4\pi r^2 \rho_0(r)$ в H_2 и He .

приводят к устойчивой связи в молекуле водорода: заряд из периферических областей переходит в область связи.

б) Влияние корреляций на плотность заряда невелико; пользуясь представлениями, развитыми в гл. 1, § 4, можно сказать, что диагональный элемент одночастичной матрицы плотности относится к числу величин, сравнительно малочувствительных к корреляциям между электронами.

в) Описание в рамках самосогласованного поля дает несколько размазанную плотность, тогда как корреляции имеют тенденцию несколько сжимать облако электронного заряда.

2. Плотность распределения по импульсам

Если пространственная волновая функция системы задана, то, как показано в § 4, можно построить волновую функцию в импульсном пространстве. Выше отмечалось, что плотность заряда определяет диагональный элемент одночастичной матрицы плотности. С другой стороны, динамические эффекты находят отражение в недиагональных элементах матрицы плотности, и поэтому, изучая распределение электронов по импульсам, можно рассчитывать на получение довольно разнообразной информации о роли корреляции между электронами.

Определим (по аналогии с тем, как это было сделано для случая атомов в § 4) функцию распределений по импульсам $I(p)$, причем $I(p) dp$ есть вероятность найти электрон с импульсом, лежащим между p и $p + dp$. Функция $I(p)$ следующим образом связана с бесспиновой одночастичной матрицей плотности $\gamma(\mathbf{r}\mathbf{r}')$:

$$I(p) = \frac{p^2}{2\pi^2} \int \int \gamma(\mathbf{r}\mathbf{r}') \frac{\sin p |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{p |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (7.5)$$

К сожалению, вычисления $I(p)$ проводились, по-видимому, только с „наилучшей“ самосогласованной волновой функцией [112]; этот результат изображен на фиг. 7 (кривая 1).

Поэтому для оценки влияния электронных корреляций на $I(p)$ мы приводим на фиг. 7 также результаты для Не в случаях а) волновой функции в приближении самосогласованного поля (кривая 2) и б) коррелированной волновой функции Эккарта — Хиллерааса (кривая 3)¹⁾.

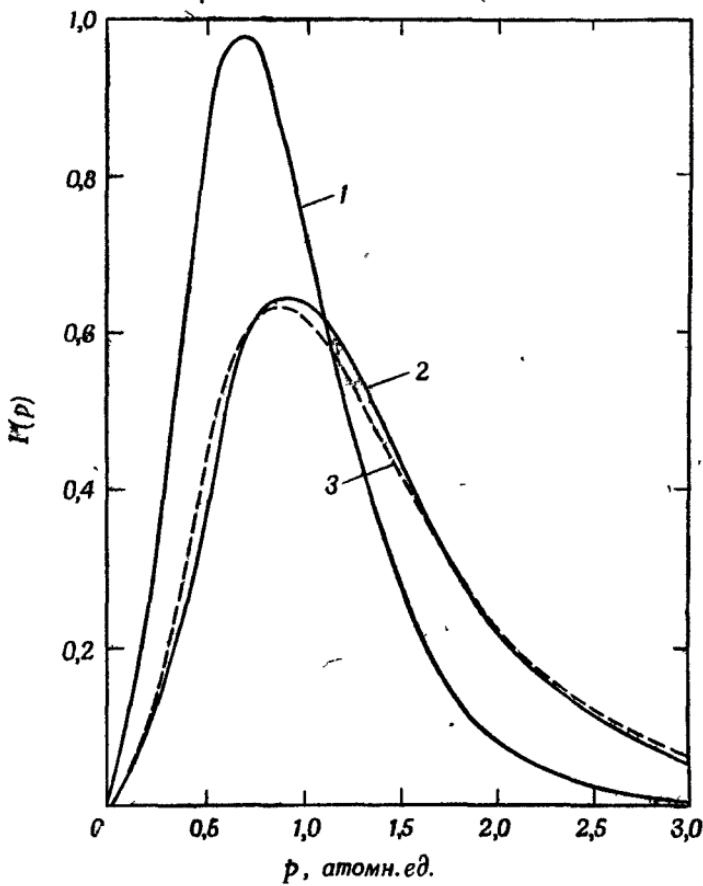
Эти результаты качественно сходны с выражением (4.6) для функции $I(p)$, полученным для основного состояния атома водорода. Однако сравнение двух кривых для Не на фиг. 7 показывает, что под влиянием корреляций функция $I(p)$ становится более размытой и, следовательно, средний импульс \bar{p} и средняя кинетическая энергия $\bar{p^2}/2m$ увеличиваются.

¹⁾ Пространственная часть этой волновой функции имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2) = N \{ e^{-ar_1}e^{-br_2} + e^{-br_1}e^{-ar_2} \},$$

где N — коэффициент нормировки, $a = 2,1832$ и $b = 1,1886$; в этой волновой функции электронам с противоположными направлениями спинами приписываются различные орбиты. Соответствующее распределение плотности заряда показано на фиг. 6 (кривая 5), где приведено также распределение плотности заряда, вычисленное в приближении самосогласованного поля (кривая 4).

Разумеется, эти факты согласуются со сделанным выше утверждением о том, что введение корреляций в волновую функцию свободных частиц увеличивает их кинетическую энергию. Рас-



Фиг. 7. Функция распределения по импульсам $I(p)$ для He и H_2 .

смотрим в заключение вопрос о среднем значении r_{12} , определяющем прирост потенциальной энергии.

3. Распределение вероятности для расстояния между электронами

Барнет, Бирс и Коулсон [13] рассмотрели, как изменяется среднее значение r_{12} в зависимости от степени учета корреляций в волновой функции основного состояния H_2 . Мы кратко изложим их результаты. Для полученной методом молеку-

лярных орбиталей функции (7.2), которая состоит из водородных функций без учета константы экранирования (т. е. $Z = 1$), среднее значение $\langle r_{12} \rangle$ равно $2,37a_0$, тогда как расстояние между ядрами равно $1,4 a_0$. При использовании „наилучшего“ вариационного значения $Z = 1,193$ среднее значение $\langle r_{12} \rangle$ уменьшается до $2,04 a_0$. С другой стороны, средние межэлектронные расстояния в методе Гайтлера — Лондона, соответствующие этим двум значениям константы экранирования, составляют $2,49 a_0$ и $2,20 a_0$. Весьма естественно, что в приближении „сильной связи“ электроны больше удалены друг от друга; как подчеркивалось выше, потенциальная энергия, пропорциональная среднему значению r_{12}^{-1} , значительно понижается при увеличении расстояния между электронами.

Итак, в настоящей главе мы убедились в том, что приближенная оценка роли самосогласованного поля в атомах приводит (в нерелятивистском приближении) к следующим результатам для тяжелых атомов: 1) полная энергия связи пропорциональна $Z^{7/5}$; 2) средний импульс, приходящийся на один электрон, пропорционален $Z^{2/5}$; 3) средний радиус электронного облака пропорционален $Z^{-1/5}$ [ср. (3.4)]. Следует еще раз обратить внимание на то, что зависимость полной энергии атома от числа Z электронов в нем, имеющая вид $Z^{7/5}$, противоречит положению, с которым мы встретимся в истинно многочастичных задачах (см. ниже). В указанном классе задач разрешен статистический предельный переход, когда число частиц в системе может стремиться к бесконечности, и сохраняет смысл лишь понятие энергии, приходящейся на одну частицу. Кроме того, мы особо подчеркнули важность как динамических, так и статистических (возникающих вследствие принципа Паули) корреляций для систем ферми-частиц. В частности, во всем дальнейшем изложении центральное место займут два понятия, которые были введены выше на примере двухэлектронных систем: распределение частиц по импульсам и плотность вероятности расстояния между частицами.

Наконец, отметим, что мы не пытались рассмотреть детальную оболочечную структуру, столь характерную для теории атома. Дело в том, что подавляющее большинство авторов, изучавших проблему электронной структуры атома, использовало прямые численные методы решения уравнений Хартри — Фока, и соответствующие результаты уже изложены исчерпывающим образом. С другой стороны, по-видимому, можно не без успеха применить к построению теории атома методы теории возмущений для систем многих частиц, описанные в гл. 4¹⁾.

¹⁾ См. Н. Р. Келли, Phys. Rev., 173, 142 (1968).

ЗАДАЧИ

2.1. С помощью волновых функций (7.1) и (7.2) вычислить плотность заряда в молекуле H_2 , используя в качестве орбиталей водородные $1s$ -функции. Оценить величину интеграла перекрытия

$$S = \int \psi_a(1) \psi_b(1) d\tau_1,$$

если расстояние между ядрами $R = 1.4a_0$. Найти значение $\rho(r)$ в средней точке водородной связи и сравнить его с плотностью заряда, полученной путем суперпозиции атомных волновых функций для того же значения R .

2.2. Дать вывод распределения вероятности (5.7) для расстояния r_{12} между электронами в атоме He .

2.3. Показать, что функции $I(p)$ распределения электронов по импульсам в атоме He при использовании волновой функции Эккарта – Хиллерааса записывается в виде

$$I(p) = \frac{p^2}{4\pi \left[\frac{a^{-3}b^{-3}}{64} + (a+b)^{-6} \right]} \left\{ \frac{a^2}{b^3 (a^2 + p^2)^4} + \right. \\ \left. + \frac{16ab}{(a+b)^3 (a^2 + p^2)^2 (b^2 + p^2)^2} + \frac{b^2}{a^3 (b^2 + p^2)^4} \right\}.$$

2.4. Вычислить поправочные члены порядка Z^2 и $Z^{7/3}$ к выражению (2.8) для энергии связи

$$\text{Ответ: } \epsilon = \left\{ -\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} Z^{7/3} + \frac{1}{2} Z^2 - \frac{1}{18} \left(\frac{3}{2}\right)^{2/3} Z^{5/3} + \dots \right\} \frac{e^2}{a_0}.$$

Дать грубую оценку поправки к результату Томаса – Ферми (3.11), обусловленную наличием обменной энергии. Считать, что для N свободных электронов, заключенных в объеме Ω , плотность обменной энергии имеет вид

$$-\frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \left(\frac{N}{\Omega}\right)^{4/3}.$$

Указать, в частности, зависимость найденной поправки от атомного номера Z при больших значениях Z .

2.5. Вычислить для основного состояния атома гелия а) среднюю кинетическую энергию электронов и б) среднее значение r_{12} , используя одночастичную матрицу плотности, определенную в (6.4). В каждом случае обосновать выбор константы экранирования α и сравнить его со значением α , минимизирующим полную энергию.

2.6. Дать дальнейшее развитие понятия ферми-дырки, показав, что парная функция $g(r)$ обращается в нуль в точке $r=0$ для свободных частиц с параллельными спинами, занимающих состояния внутри сферы Ферми. Объяснить, почему, согласно формуле (1.5.13), значение $g(0)$ равно $1/2$, а не нулю.

Глава 3

ВТОРИЧНОЕ КВАНТОВАНИЕ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

До сих пор мы имели дело с волновыми функциями Шредингера, соответствующими гамильтониану (1.2.2), а также с матрицами плотности, построенными на их основе. Но, записывая, например, в гл. 1 многочастичную волновую функцию для фермионов в виде разложения по детерминантам, мы практически ограничивались лишь одним слагаемым.

Указанный подход в ряде случаев оказывается практически мало пригодным, в особенности при попытке обобщить его, чтобы учесть взаимодействие между различными конфигурациями. Эта трудность естественным образом подводит нас к идее об использовании представления чисел заполнения, которое рассматривается ниже.

§ 2. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ

При построении волновой функции многих бозонов (фермионов) нам приходилось проводить процедуру симметризации (антисимметризации), учитывающую квантовую неразличимость частиц. Эта процедура приводила к громоздкой записи, поэтому естественно обратиться к иному способу описания. Будем указывать теперь только то, какие из возможных одночастичных уровней заняты и сколько частиц находится на каждом из этих уровней (т. е. числа заполнения уровней); по существу эти данные содержат максимальную информацию, совместимую с принципом неразличимости частиц. Тогда функции, служащие базисом в разложении многочастичных волновых функций для бозонов и фермионов [см. формулы (1.2.9) и (1.2.10) соответственно], можно представить в следующем виде:

$$|n_1 \dots n_N \dots\rangle, \quad (2.1)$$

где n_k — число частиц на уровне, которому соответствует волновая функция Φ_k . Ясно, что в случае фермионов n_k может принимать лишь значения 0 или 1, тогда как в случае бозонов на значения n_k не налагается никаких ограничений. Для системы с фиксированным числом частиц N числа n_i в (2.1)

должны удовлетворять условию $\sum_i n_i = N$. Другое преимущество новой записи, как мы увидим, состоит в том, что она позволяет включить в рассмотрение системы с переменным числом частиц.

Выражение (2.1) можно рассматривать как вектор состояния в пространстве Фока. Координатным представлением такого вектора является выражение (1.2.9) для бозонов и (1.2.10) для фермионов. Для использования представления (2.1) мы должны, очевидно, научиться выражать гамильтониан через операторы, способные действовать на векторы состояния в таком представлении.

§ 3. ОПЕРАТОРЫ РОЖДЕНИЯ И УНИЧТОЖЕНИЯ

Введем с этой целью операторы a_k , называемые операторами уничтожения, и эрмитово сопряженные им операторы a_k^\dagger , называемые операторами рождения.

1. Бозоны

Рассмотрим сначала систему бозонов; в этом случае операторы a_k и a_k^\dagger определяются следующим образом:

$$a_k | \dots, n_k, \dots \rangle = \sqrt{n_k} | \dots, n_k - 1, \dots \rangle \quad (3.1)$$

и

$$a_k^\dagger | \dots, n_k, \dots \rangle = \sqrt{n_k + 1} | \dots, n_k + 1, \dots \rangle. \quad (3.2)$$

Как видно из определения (3.1), оператор a_k при действии на вектор состояния в пространстве Фока, содержащий n_k частиц на уровне Φ_k , переводит его в вектор состояния с $n_k - 1$ частицами на том же уровне; числа заполнения всех остальных уровней остаются неизменными. Аналогично оператор a_k^\dagger увеличивает число заполнения уровня Φ_k на единицу. Множитель, стоящий перед вектором состояния в правой части (3.1), необходим для нормировки волновых функций с N и $N - 1$ частицами. Чтобы согласовать приведенные выше определения с требованием эрмитовой сопряженности операторов a_k и a_k^\dagger , в правую часть (3.2) следует ввести множитель $\sqrt{1 + n_k}$. В этом можно убедиться, вычислив матричный элемент $\langle n_{k'} | a_k | n_k \rangle$ и сравнив его с матричным элементом $\langle n_k | a_k^\dagger | n_{k'} \rangle$. (В дальнейшем, так же как в этих выражениях, мы часто будем писать $| n_k \rangle$ вместо $| \dots, n_k, \dots \rangle$.)

Из определений (3.1) и (3.2) сразу же следует

$$a_k a_k^\dagger |n_k\rangle = (n_k + 1) |n_k\rangle, \quad (3.3)$$

и

$$a_k^\dagger a_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle. \quad (3.4)$$

Вычитая затем (3.4) из (3.3), получаем

$$(a_k a_k^\dagger - a_k^\dagger a_k) |n_k\rangle = |n_k\rangle. \quad (3.5)$$

Ввиду того что в многобозонных задачах операторы действуют обычно на линейные комбинации симметризованных произведений, для указанного класса функций можно записать следующее операторное равенство:

$$a_k a_k^\dagger - a_k^\dagger a_k = [a_k, a_k^\dagger] = 1. \quad (3.6)$$

Тем же способом нетрудно доказать и более общие соотношения

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad (3.7)$$

$$[a_k, a_{k'}] = 0 = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger]. \quad (3.8)$$

Для большинства приложений нам достаточно знать только основные перестановочные соотношения (3.7) и (3.8) для операторов рождения и уничтожения.

2. Фермионы

Переходя к случаю системы фермионов, предположим, что все одночастичные энергетические уровни определенным образом упорядочены. Поскольку, как было показано выше, в случае фермионов числа заполнения n_k принимают значения 0 и 1, для определения вектора состояния достаточно указать лишь значения импульса k у занятых уровней. Тогда вектор состояния (N -частичный детерминант), в котором имеется N уровней, определяемых числом k и расположенных в соответствии с принятым порядком, можно записать в виде $| \dots k \dots \rangle$. Под вектором состояния $| \dots k \dots \rangle$ будем понимать многочастичный детерминант, в котором отсутствует состояние Φ_k . Ввиду того что координатная зависимость Φ_k здесь не играет роли, детерминант $| \dots k \dots \rangle$ можно получить из состояния (детерминанта) $| \dots k \dots \rangle$ вычеркиванием столбца (строки), соответствующего уровню k с одновременным вычеркиванием произвольной строки (столбца) и соответствующим изменением нормировки.

Оператор уничтожения для случая фермионов определится следующим образом:

$$a_k | \dots k \dots \rangle = (-1)^m | \dots k \dots \rangle, \quad (3.9)$$

где m — число уровней, предшествующих уровню k в векторе состояния; кроме того,

$$a_k | \dots \not{k} \dots \rangle = 0. \quad (3.10)$$

Уравнения (3.9) и (3.10) определяют действие оператора a_k на любой детерминант и, таким образом, на любую N -частичную волновую функцию, которая может быть разложена по таким детерминантам.

Аналогично оператор рождения a_k^\dagger можно определить следующим образом:

$$a_k^\dagger | \dots \not{k} \dots \rangle = (-1)^m | \dots k \dots \rangle, \quad (3.11)$$

где, как и выше, m — число энергетических уровней, непосредственно предшествующих уровню k в векторе состояния, а

$$a_k^\dagger | \dots k \dots \rangle = 0. \quad (3.12)$$

Из определений (3.9) — (3.12) можно вывести перестановочные соотношения, аналогичные рассмотренным выше для случая бозонов соотношениям (3.6) — (3.8).

Рассмотрим прежде всего совместное действие пары операторов рождения — уничтожения на произвольный N -частичный детерминант.

Случай $k' \neq k$. Не нарушая общности, предположим, что уровень k' предшествует уровню k в принятой схеме упорядочения (ход рассуждений сохранится и в противном случае). Тогда можно написать

$$a_{k'}^\dagger a_k | \dots \not{k'} \dots k \dots \rangle = (-1)^m | \dots k' \dots \not{k} \dots \rangle,$$

где m — число уровней между k' и k .

Очевидно, если в векторе состояния отсутствуют как уровень k' , так и k , то действие пары $a_{k'}^\dagger a_k$ на этот вектор дает нуль в силу (3.10); если же оба уровня присутствуют, то нулевой результат получается в силу (3.12).

Случай $k' = k$. Если уровень $k' (= k)$ входит в вектор состояния, имеем (m — число уровней, предшествующих k)

$$\begin{aligned} a_k^\dagger a_k | \dots k \dots \rangle &= a_k^\dagger (-1)^m | \dots \not{k} \dots \rangle = \\ &= (-1)^m (-1)^m | \dots k \dots \rangle = 1 | \dots k \dots \rangle. \end{aligned}$$

Если уровень $k' (= k)$ отсутствует в векторе состояния, то

$$a_k^+ a_k | \dots \not{k} \dots \rangle = 0.$$

Таким образом, как и в случае бозонов [см. (3.4)], оператор $a_k^+ a_k$ дает число заполнения уровня (состояния) k .

Изучим теперь совместное действие на вектор состояния пары операторов уничтожения — рождения.

Случай $k' \neq k$. Предположим, как и ранее, что уровень k' предшествует k . Тогда

$$a_k a_{k'}^+ | \dots \not{k'} \dots k \dots \rangle = (-1)^{m-1} | \dots k' \dots \not{k} \dots \rangle,$$

где m — число уровней между k' и k . В любом другом случае

$$a_k a_{k'}^+ | \dots \rangle = 0.$$

Случай $k' = k$. Как и в рассмотренном выше случае, имеем

$$a_k a_k^+ | \dots k \dots \rangle = 0$$

и

$$a_k a_k^+ | \dots \not{k} \dots \rangle = | \dots \not{k} \dots \rangle.$$

Важное следствие, вытекающее из приведенного выше анализа, состоит в том, что для совершенно произвольного детерминанта $| \dots \rangle$ имеет место соотношение

$$(a_{k'}^+ a_k + a_k a_{k'}^+) | \dots \rangle = \delta_{k'k} | \dots \rangle.$$

Тогда, если считать, что операторы a и a^\dagger всегда действуют лишь на волновые функции, которые можно представить в виде линейных комбинаций детерминантов, то имеет место следующее операторное равенство [ср. вывод формулы (3.7)]

$$a_{k'}^+ a_k + a_k a_{k'}^+ = \delta_{k'k}. \quad (3.13)$$

Рассматривая пары, состоящие только из операторов рождения или уничтожения, можно получить следующие простые соотношения:

$$a_k a_k + a_k a_{k'} = 0, \quad (3.14)$$

$$a_k^+ a_k^+ + a_k^+ a_{k'}^+ = 0. \quad (3.15)$$

Для большинства приложений достаточно помнить лишь эти антикоммутационные (в отличие от коммутационных для бозонов) соотношения.

§ 4. ОПЕРАТОР ЧИСЛА ЧАСТИЦ

Как и предполагалось выше, оператор N_k числа частиц, находящихся в одночастичном состоянии Φ_k , для обоих типов статистики имеет вид

$$N_k = a_k^\dagger a_k; \quad (4.1)$$

базисные кет-векторы $| \dots n_k \dots \rangle$ являются собственными векторами этого оператора, соответствующими собственному значению n_k . Для фермионов непосредственно из антикоммутационных соотношений (3.13)–(3.15) следует, что $N_k^2 = N_k$. Следовательно, собственными значениями N_k могут быть лишь числа 0 и 1 (в этом нетрудно убедиться, рассматривая, как показано выше, действие оператора $a_k^\dagger a_k$ на вектор состояния при $k' = k$). Для бозонов собственные значения оператора числа частиц принимают все положительные целочисленные значения, включая нуль [см. (3.4)].

Определим оператор N полного числа частиц:

$$N = \sum_k N_k. \quad (4.2)$$

Как нетрудно показать,

$$[N_k, N_{k'}] = 0, \quad (4.3)$$

откуда сразу следует, что базисные кет-векторы (2.1) являются одновременно собственными векторами оператора N с собственными значениями $\sum_k n_k$. Как было отмечено выше, одно из преимуществ любого формализма, основанного на представлении чисел заполнения, состоит в том, что число частиц в системе не обязательно должно быть фиксированным.

Далее, можно показать, что для обоих видов статистики имеют место перестановочные соотношения

$$[N_k, a_k] = -a_k \quad (4.4)$$

и

$$[N_k, a_k^\dagger] = a_k^\dagger. \quad (4.5)$$

§ 5. ВАКУУМНОЕ СОСТОЯНИЕ

Рассмотрим N -частичный детерминант. „Извлекая“ из него оператор рождения, этот детерминант можно представить в виде

$$| \dots k \dots \rangle = (-1)^m a_k^\dagger | \dots k \dots \rangle,$$

где m – число уровней, предшествующих k . Продолжая этот процесс „извлечения“ операторов рождения, мы приходим

в результате к произведению операторов рождения, действующих на одночастичное состояние. Однако оборвать процесс на этой стадии значило бы выделить одночастичное состояние по сравнению с другими, что представляется нежелательным как с физической, так и с математической точек зрения. Поэтому мы логически завершим указанный процесс „извлечения“ оператора рождения, определив вакуумное состояние $|0\rangle$ следующим равенством:

$$a_k^\dagger |0\rangle = |k\rangle \quad \text{для всех } k. \quad (5.1)$$

Соотношение (5.1) определяет лишь одно (но основное) свойство вакуумного состояния. В принципе этому состоянию можно присвоить также любые другие непротиворечивые свойства; некоторые из них оказываются полезными по следующей причине. При выводе антикоммутационных соотношений для фермионов молчаливо предполагалось, что набор одночастичных состояний, входящих в детерминант (полную волновую функцию) достаточен для того, чтобы все операции были определены. Так, например, если этот набор состоит из одного элемента, то не имеет смысла говорить о действии оператора a_k на произвольное одночастичное состояние $|k'\rangle$. В частности, вывод перестановочного соотношения (3.13) сохраняет силу лишь для состояний с двумя или более частицами. Мы заинтересованы, однако, в использовании операторных соотношений вне зависимости от того, как много (или, скорее, как мало!) одночастичных состояний входит в вектор состояния; поэтому припишем вакуумному состоянию $|0\rangle$ следующие простые свойства, дополняющие (5.1):

$$a_k |k\rangle = |0\rangle \quad \text{для всех } k, \quad (5.2)$$

$$a_k |0\rangle = 0 \quad \text{для всех } k \quad (5.3)$$

и

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1. \quad (5.4)$$

В каждом отдельном случае можно непосредственно убедиться в том, что если выполняются свойства (5.1)–(5.3), антикоммутационные соотношения сохраняют силу для всех состояний, не содержащих ни одной или содержащих одну или две частицы. Свойство (5.4), нормирующее, как и в случае детерминантной волновой функции, вакуумное состояние на единицу, необходимо для того, чтобы обеспечить эрмитову сопряженность операторов a_α и a_α^\dagger . Имеем, например,

$$\langle 0 | a_\alpha | \beta \rangle = \langle 0 | 0 \rangle \delta_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} = \langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | a_\alpha^\dagger | 0 \rangle.$$

§ 6. ОПЕРАТОРЫ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ

Теперь мы можем вернуться к своей основной задаче, а именно выразить операторы динамических величин, и в особенности гамильтониан (1.2.2), через операторы a_k . Для удобства определим по отдельности кинетическую и потенциальную энергию, входящие в гамильтониан:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \quad (6.1)$$

и

$$V = \sum_{i < j} v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (6.2)$$

Вид произвольного одночастичного оператора в представлении вторичного квантования получен в приложении I. Используя этот результат, можно сразу показать, что оператор T записывается в виде

$$T = \sum_{\text{все } k} \epsilon_k a_k^\dagger a_k, \quad (6.3)$$

где a_k^\dagger и a_k — операторы, определенные по отношению к совокупности одночастичных состояний в виде плоских волн, и $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$; индекс k относится, вообще говоря, к импульсу и спину.

Оператор V в представлении вторичного квантования можно получить с помощью очевидного, но довольно громоздкого, обобщения выкладок, проведенных в приложении I; окончательный результат имеет вид

$$V = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} \langle k_1 k_2 | v | k'_2 k'_1 \rangle a_{k'_1}^\dagger a_{k'_2}^\dagger a_{k'_1} a_{k'_2}. \quad (6.4)$$

Следует обратить особое внимание на порядок операторов в (6.4); этот порядок должен строго соблюдаться во всех последующих действиях с фермионами, поскольку ферми-операторы антисимметричны (в случае бозонов соответствующие операторы коммутируют, и их порядок не играет роли).

Если выбрать более общий набор ортонормированных одночастичных состояний φ_a с соответствующими операторами рождения и уничтожения c_a^\dagger и c_a , то в оператор кинетической

энергии, разумеется, войдут и недиагональные члены, так что гамильтониан примет вид

$$\tilde{H} = \sum \langle \alpha | T | \beta \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \frac{1}{2} \sum \langle \alpha \beta | v | \delta \gamma \rangle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}. \quad (6.5)$$

Представление (6.5) будет иногда использоваться ниже, но, как правило, нам будет достаточно формы (6.3) и (6.4). Итак, наша цель достигнута: гамильтониан выражен через операторы, действующие на векторы состояния в пространстве Фока.

§ 7. ПОЛЕВЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Вместо описания в терминах операторов a_k и a_k^{\dagger} можно пользоваться другим описанием, к которому нам удобно сейчас перейти. Введем оператор

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_k a_k \varphi_k(\mathbf{x}) \quad (7.1)$$

и

$$\psi^{\dagger}(\mathbf{x}) = \sum_k a_k^{\dagger} \varphi_k^*(\mathbf{x}). \quad (7.2)$$

Применяя основные правила для перестановок операторов рождения и уничтожения, легко доказать, что для бозонов имеют место следующие соотношения:

$$[\psi(\mathbf{x}), \psi^{\dagger}(\mathbf{x}')]=\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \quad (7.3)$$

$$[\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}')]=0=[\psi^{\dagger}(\mathbf{x}), \psi^{\dagger}(\mathbf{x}')]. \quad (7.4)$$

Результат для фермионов получается заменой коммутаторов на антисимметрические в (7.3) и (7.4). Можно интерпретировать $\psi(\mathbf{x})$ (см., например, книгу Швебера [185]) как оператор уничтожения частицы в точке \mathbf{x} , а $\psi^{\dagger}(\mathbf{x})$ — как соответствующий оператор рождения. Тогда, например, оператор полного числа частиц, выраженный через ψ и ψ^{\dagger} , имеет вид

$$N = \sum_k N_k = \sum_k a_k^{\dagger} a_k = \int \sum_{kk'} a_k^{\dagger} \varphi_k^*(\mathbf{x}) a_{k'} \varphi_{k'}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \\ = \int \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (7.5)$$

Наконец, часто бывает полезно выразить гамильтониан H , определенный соотношениями (6.3) и (6.4), через операторы ψ и ψ^{\dagger} (7.1) и (7.2). Оператор потенциальной энергии V ,

определенный выражениями (6.2) и (6.4), можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} & \int \int \Phi_{k_1}^*(\mathbf{x}_1) \Phi_{k_2}^*(\mathbf{x}_2) v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \Phi_{k'_1}(\mathbf{x}_1) \Phi_{k'_2}(\mathbf{x}_2) \times \\ & \times a_{k'_2}^\dagger a_{k'_1}^\dagger a_{k'_1} a_{k'_2} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 = \\ & = \frac{1}{2} \int \int \psi^\dagger(\mathbf{x}_2) \psi^\dagger(\mathbf{x}_1) v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_1) \psi(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2. \quad (7.6) \end{aligned}$$

Аналогично при учете одночастичного слагаемого U_1 в потенциальной энергии получаем в представлении полевых операторов выражение

$$\int \psi^\dagger(\mathbf{x}) U_1(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (7.7)$$

Выражения (7.6) и (7.7) совместно с членом, описывающим кинетическую энергию, и дают искомую форму полного гамильтонiana.

§ 8. СТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ХАРТРИ — ФОКА

Весьма поучительно записать уравнения Хартри — Фока, используя вторично-квантованные операторы рождения и уничтожения для фермионов.

Пусть имеется набор ортонормированных одночастичных состояний $|k\rangle$, и a_k^\dagger, a_k — соответствующие операторы рождения и уничтожения. Тогда N -частичный кет-вектор $|N\rangle$, пригодный для наших целей, имеет вид $a_{k_1}^\dagger \dots a_{k_N}^\dagger |0\rangle$, где $|k_1\rangle \dots |k_N\rangle$ — заполненные уровни в состоянии $|N\rangle$.

1. Недиагональная форма гамильтониана

Удобно рассмотреть новую совокупность операторов рождения и уничтожения, которые определяются как линейная комбинация операторов a и a^\dagger следующим образом:

$$\begin{aligned} c_k &= \sum_{s=1}^N a_{ks} a_s \quad (k = 1, \dots, N), \\ c_k &= \sum_{s=N+1}^{\infty} a_{ks} a_s \quad (k = N+1, \dots, \infty). \end{aligned} \quad (8.1)$$

Здесь a_{ks} — некоторые константы; операторы c_k^\dagger получаются из (8.1) с помощью операции эрмитового сопряжения. Гамильтониан

точка можно записать в виде

$$H = \sum \langle k | T | m \rangle c_k^\dagger c_m + \frac{1}{2} \sum \langle kl | v | nm \rangle c_k^\dagger c_l^\dagger c_m c_n. \quad (8.2)$$

Среднее значение H по произвольному состоянию $|N\rangle$ выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle N | H | N \rangle &= \sum_{km} \langle k | T | m \rangle \langle N | c_k^\dagger c_m | N \rangle + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum \langle kl | v | nm \rangle \langle N | c_k^\dagger c_l^\dagger c_m c_n | N \rangle. \end{aligned}$$

Используя свойство полноты системы базисных волновых функций, легко показать, что

$$\begin{aligned} \langle N | c_k^\dagger c_l^\dagger c_m c_n | N \rangle &= \langle N | c_k^\dagger c_n | N \rangle \langle N | c_l^\dagger c_m | N \rangle - \\ &\quad - \langle N | c_k^\dagger c_m | N \rangle \langle N | c_l^\dagger c_n | N \rangle. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Тогда $\langle N | H | N \rangle$ можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle N | H | N \rangle &= \sum_{km} \langle k | T | m \rangle \langle m | \gamma | k \rangle + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl | v | nm \rangle \langle n | \gamma | k \rangle \langle m | \gamma | l \rangle - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle kl | v | nm \rangle \langle m | \gamma | k \rangle \langle n | \gamma | l \rangle = \\ &= \sum_{km} \langle k | T | m \rangle \langle m | \gamma | k \rangle + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{klmn} (\langle kl | v | nm \rangle - \langle kl | v | mn \rangle) \langle m | \gamma | l \rangle \langle n | \gamma | k \rangle, \end{aligned} \quad (8.4)$$

где

$$\langle m | \gamma | k \rangle = \langle N | c_k^\dagger c_m | N \rangle. \quad (8.5)$$

Из определения (8.5) можно сразу вывести два свойства оператора γ , если отождествить операторы c с операторами a . Тогда, очевидно,

$$\langle m | \gamma | k \rangle = \langle N | a_k^\dagger a_m | N \rangle = 0 \quad \text{при } m \neq k$$

(то же верно при $m > N$); если $m = k < N$, то $\langle m | \gamma | k \rangle = 1$. Отсюда ясно, что

$$\text{Sp } \gamma = N \quad (8.6)$$

и

$$\gamma^2 = \gamma. \quad (8.7)$$

Эти результаты, доказанные для очень специального выбора α_{ks} в (8.1), можно распространить и на общий случай.

Уравнения Хартри — Фока получаются путем минимизации среднего значения $\langle N | H | N \rangle$ при наличии дополнительных условий (8.6) и (8.7) для оператора γ (ср. гл. 1, § 10).

Формально мы имеем $\delta \langle N | H | N \rangle = 0$, что означает

$$\langle \delta N | H | N \rangle = 0, \quad (8.8)$$

где $|\delta N\rangle$ — состояние, отличное от $|N\rangle$. Ограничимся классом векторов состояния, по-прежнему представимых в терминах антисимметризованных произведений одночастичных состояний; точнее, будем считать, что

$$|\delta N\rangle = \epsilon c_p^\dagger c_q |N\rangle, \quad (8.9)$$

где $p > N$, $q < N$, ϵ — малый параметр. Подставляя (8.9) в (8.8), получаем для любых $p > N$ и $q < N$

$$\begin{aligned} \sum_{km} \langle N | c_q^\dagger c_p \langle k | T | m \rangle c_k^\dagger c_m | N \rangle + \\ + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \langle N | c_q^\dagger c_p \langle kl | v | nm \rangle c_k^\dagger c_l^\dagger c_m c_n | N \rangle = 0. \end{aligned} \quad (8.10)$$

При суммировании по k , m в первом члене (8.10) обращаются в нуль все слагаемые, кроме тех, у которых $k = p$ и $m = q$.

Аналогично при суммировании по k , l , m , n во втором члене (8.10) сохраняются лишь слагаемые с одним из следующих наборов индексов

- 1) $k = p$, $n = l$, $m = q$; 2) $k = m$, $l = p$, $n = q$;
- 3) $k = p$, $m = l$, $n = q$; 4) $k = n$, $l = p$, $m = q$.

После выполнения суммирования уравнение (8.10) принимает вид

$$\begin{aligned} \langle p | T | q \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (\langle kp | v | kq \rangle - \langle kp | v | qk \rangle) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N (\langle pl | v | ql \rangle - \langle pl | v | lq \rangle) = 0, \end{aligned}$$

или

$$\langle p | T | q \rangle + \sum_{l=1}^N (\langle pl | v | ql \rangle - \langle pl | v | lq \rangle) = 0, \quad (8.11)$$

где все $p > N$, $q \leqslant N$. Введем теперь новый одночастичный гамильтониан

$$H_s = \left[\sum_p \sum_q \left\{ \langle p | T | q \rangle + \sum_{l=1}^N (\langle pl | v | ql \rangle - \langle pl | v | lq \rangle) \right\} \right] c_p^\dagger c_q, \quad (8.12)$$

в котором сняты ограничения на значения индексов p и q .

Этот новый гамильтониан обладает следующим важным свойством:

$$\langle p | H_s | q \rangle = 0, \quad (8.13)$$

где $|q\rangle$ и $|p\rangle$ — соответственно занятый и свободный уровни.

Выше уже подчеркивалось, что мы могли бы работать с различными полными системами одночастичных состояний. Полезно выбрать одну из таких систем, взяв подходящую линейную комбинацию одночастичных состояний из подпространства занятых и свободных одночастичных состояний.

При таком переходе к новым одночастичным волновым функциям гамильтониан (8.12) не меняется. Выберем теперь новые одночастичные состояния так, чтобы диагонализовать (8.12); тогда из (8.12) находим

$$\langle p | T | p \rangle + \sum_{l=1}^N (\langle pl | v | pl \rangle - \langle pl | v | lp \rangle) = \epsilon_p, \quad (8.14)$$

где ϵ_p — собственные значения одночастичных состояний с импульсом p . Эти значения называются самосогласованными энергиями уровней; они дают хорошее приближенное описание одночастичных возбуждений системы, если p находится вблизи поверхности Ферми.

Среднее значение H по полученному таким способом пробному основному состоянию имеет вид

$$E_0 = \sum_{p=1}^N \langle p | T | p \rangle + \frac{1}{2} \sum_p \sum_l (\langle pl | v | pl \rangle - \langle pl | v | lp \rangle). \quad (8.15)$$

Как показано в гл. 1 с помощью прямых вычислений, основанных на волновых функциях, уравнения (8.14) являются уравнениями Хартри — Фока, из которых следует, что полная энергия системы описывается выражением (8.15).

§ 9. ОПИСАНИЕ ФЕРМИОНОВ КАК ЧАСТИЦ — ДЫРОК

Как мы видели в гл. 1, в системе свободных фермионов низшие состояния в k -пространстве заняты вплоть до фермиеvского волнового числа k_f ; этим состояниям соответствуют

волновые функции вида $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$. Влияние взаимодействий, которое при достаточно общих предположениях обсуждалось в гл. 2, приводит к тому, что некоторые частицы переходят в состояния с большими значениями импульса. Полезно сосредоточить внимание только на отклонении импульсного распределения от первоначального распределения Ферми, и описывать возбужденные состояния системы в терминах частиц, возникающих выше поверхности Ферми, и дырок, остающихся внутри этой поверхности. Определим с этой целью новые операторы следующими равенствами:

$$b_{\mathbf{k}} = \begin{cases} a_{\mathbf{k}}(k > k_f), \\ a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(k < k_f), \end{cases} \quad b_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \begin{cases} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(k > k_f), \\ a_{\mathbf{k}}(k < k_f). \end{cases} \quad (9.1)$$

Легко видеть, что определенные таким образом операторы b и b^{\dagger} удовлетворяют антисимметрическим соотношениям типа (3.13) – (3.15). Волновая функция $|g\rangle$ основного состояния системы свободных бессpinовых фермионов, которая имеет следующий вид:

$$|g\rangle = \prod_{k < k_f} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle, \quad (9.2)$$

согласно (5.1) обладает свойством

$$b_{\mathbf{k}} |g\rangle = 0 \text{ для всех } k. \quad (9.3)$$

Используя антисимметрические соотношения и свойства (5.3), легко показать, что $\langle g | g \rangle = 1$. Таким образом, мы убеждаемся в том, что в новом описании заполненная сфера Ферми играет роль вакуумного состояния.

С физической точки зрения, мы всегда имеем дело с рождением пары частица – дырка, если понимать под дыркой отсутствие частицы внутри сферы Ферми. Таким образом, в новом описании мы неизменно сталкиваемся с $2n$ -частичными состояниями (наличие одной пары частица – дырка соответствует $n = 1$). Например, двух- и четырехчастичным состояниям, схематически изображенными на фиг. 8 и 9, соответствуют функции

$$b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}'}^{\dagger} |g\rangle \text{ и } b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}'}^{\dagger} b_{\mathbf{k}''}^{\dagger} b_{\mathbf{k}'''^{\dagger}}^{\dagger} |g\rangle; \quad (9.4)$$

по аналогии нетрудно построить и произвольное $2n$ -частичное состояние.

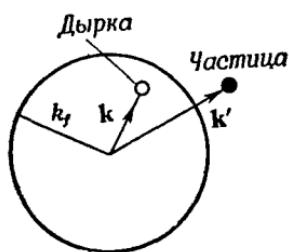
Следует отметить, что развитое выше математическое описание не является единственным (хотя оно, пожалуй, наиболее

наглядно). Например, для операторов b и b^\dagger , определяемых равенствами

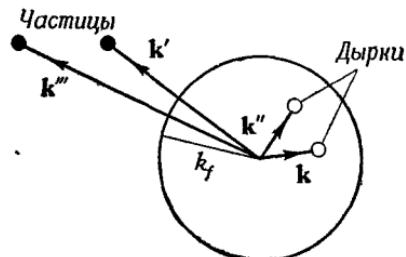
$$b_k = \begin{cases} a_k & (k > k_f), \\ -a_{-k}^\dagger & (k < k_f) \end{cases} \quad b_k^\dagger = \begin{cases} a_k^\dagger & (k > k_f) \\ -a_{-k} & (k < k_f), \end{cases} \quad (9.5)$$

по-прежнему выполняются антисимметрические соотношения. С таким описанием мы встретимся в гл. 7.

Необходимо подчеркнуть, что в пределах настоящего параграфа в понятие „частица“ вкладывался разный смысл. Так, например, в (9.4) под частицами подразумевалась совокупность исходных ферми-частиц над уровнем Ферми и дырок под этим уровнем. Для большей точности можно было бы использовать



Фиг. 8.



Фиг. 9.

здесь термин „квазичастица“, введенный в гл. 1, § 11; рассмотренный пример служит простейшей иллюстрацией этого понятия.

Заметим, что описание, основанное на представлении о частицах и дырках, означает, что мы можем игнорировать частицы, занимающие состояния с $k < k_f$ и образующие вакуум. Эти частицы, называемые пассивными, в действительности играют существенную роль в любой теории взаимодействующих фермионов. Именно взаимодействия между этими частицами, а также их взаимодействие с любой внешней частицей, движущейся в среде, в основном и определяют физические свойства системы.

Наконец, отметим, что иногда удобно рассматривать введенные в § 7 полевые операторы ψ и ψ^\dagger , одновременно используя развитый выше формализм частиц — дырок. Мы можем несколько обобщить наше описание и учесть спин, если будем считать, что индекс K указывает состояние с определенными импульсом и спином.

Переписывая определение (7.1), получаем

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{x}) &= \sum_{k < k_f} \varphi_K(\mathbf{x}) a_K + \sum_{k > k_f} \varphi_K(\mathbf{x}) a_K = \\ &= \sum_{k < k_f} \varphi_K(\mathbf{x}) b_K^\dagger + \sum_{k > k_f} \varphi_K(\mathbf{x}) b_K = \\ &= \psi_+(\mathbf{x}) + \psi_-(\mathbf{x});\end{aligned}\quad (9.6)$$

аналогичная процедура для (7.2) дает

$$\begin{aligned}\psi^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_{k < k_f} \varphi_K^*(\mathbf{x}) a_K^\dagger + \sum_{k > k_f} \varphi_K^*(\mathbf{x}) a_K^\dagger = \\ &= \sum_{k < k_f} \varphi_K^*(\mathbf{x}) b_K + \sum_{k > k_f} \varphi_K^*(\mathbf{x}) b_K^\dagger = \\ &= \psi_-^\dagger(\mathbf{x}) + \psi_+^\dagger(\mathbf{x}).\end{aligned}\quad (9.7)$$

В (9.7) мы ввели обозначения $\psi_-^\dagger = (\psi^\dagger)_-$, $\psi_+^\dagger = (\psi^\dagger)_+$, отражающие тот факт, что при наличии двух индексов сначала всегда следует проводить операцию эрмитового сопряжения, указанную верхним индексом; это означает, в частности, что $(\psi_-)^\dagger \neq \psi_-^\dagger$ и т. д. В силу свойства ферми-вакуума (9.3) имеем

$$\psi_- |g\rangle = 0 = \psi_-^\dagger |g\rangle. \quad (9.8)$$

Эти результаты понадобятся нам при построении теории возмущений в гл. 4.

ЗАДАЧИ

3.1. Как показано в § 9, для системы N фермионов можно определить операторы рождения и уничтожения частиц и дырок.

Показать, что операторы рождения и уничтожения пары частица — дырка

$$A_k^\dagger = b_{k+q}^\dagger b_k^\dagger \quad \text{и} \quad A_k = b_k b_{k+q},$$

где $|k| < k_f$ и $|k+q| > k_f$, удовлетворяют переставочным соотношениям для бозонов.

3.2. Предположим, что однофермионные состояния $|m\rangle$ (где m характеризует аддитивное квантовое число), обладающие равной энергией и образующие полную подсистему, уничтожаются (или порождаются) операторами a_m (или a_m^\dagger); предположим далее, что $|m\rangle^* = |-m\rangle$ и рассмотрим следующий гамильтониан возмущения:

$$H' = -\lambda \sum_{\substack{m_1 \geq 0 \\ m_2 > 0}} a_{m_1}^\dagger a_{-m_1}^\dagger a_{m_2} a_{-m_2}.$$

Пусть n — число различных положительных значений, которые пробегают индексы m_1 и m_2 при суммировании. Считая, что до включения возмущения две частицы могут находиться в n различных вырожденных состояниях в интервале от m до $-m$, показать, что возмущение расщепляет n -кратно вы-

рожденный уровень и уровень с энергией $n\lambda$ и $n - 1$ -кратно вырожденный уровень с иулевой энергией.

(Указание. Ввести оператор

$$A = \sum_{m>0}^n a_m^+ a_{-m}^+$$

и, вычислив коммутатор $[H', A]$, получить уравнение на собственные значения.)

3.3. Дать интерпретацию вектора состояния

$$|\psi\rangle = \prod_{m>0} (u_m + v_m a_m^+ a_{-m}^+) |0\rangle,$$

где u_m и v_m — константы, удовлетворяющие условию $u_m^2 + v_m^2 = 1$.

3.4. Определив новые операторы

$$\left. \begin{array}{l} a_m = u_m a_m - v_m a_{-m}^+ \\ a_{-m} = u_m a_{-m} + v_m a_m^+ \end{array} \right\} \quad (m > 0),$$

показать, что

$$[a_m^+, a_{m'}]_+ = \delta_{mm'}, \quad [a_m, a_{m'}]_+ = [a_m^+, a_{m'}]_+ = 0,$$

а также, что $a_m |\psi\rangle = 0$ при всех m , где состояние $|\psi\rangle$ определено в задаче 3.3.

Дать интерпретацию этих результатов. (Символ $[\alpha, \beta]_+$ означает антикоммутатор $\alpha\beta + \beta\alpha$.)

Глава 4

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ СИСТЕМЫ МНОГИХ ТЕЛ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Как мы видели в гл. 2, полная энергия малых систем (например, атомов) связана с числом частиц N , причем энергия, отнесенная к одной частице, вообще говоря, зависит от N . Системы, в которых энергия на одну частицу не зависит от числа частиц, мы будем называть насыщающимися; изучению именно таких систем посвящена оставшаяся часть книги. При нахождении объемных (в отличие от поверхностных) свойств системы мы совершаляем предельный переход, при котором N и Ω неограниченно возрастают, но плотность N/Ω остается конечной. Рассмотрим для определенности систему фермионов, взаимодействующих посредством двухчастичных сил, потенциал которых обладает конечным фурье-образом. Для случая бозонов потребуются несущественные модификации, которые в настоящей главе не обсуждаются (см., однако, гл. 8).

В настоящей главе мы считаем известным полное описание системы в отсутствие сил взаимодействия. Отсюда, вообще говоря, должна следовать возможность определения свойств системы в основном состоянии путем построения теории возмущений, в которой возмущением является потенциал взаимодействия, умноженный на константу связи.

Ниже в § 2 и 3 мы применим развитую в гл. 1 теорию возмущений к системе N бесспиновых различных частиц. При этом наша цель состоит в том, чтобы, не вдаваясь в излишние детали, продемонстрировать трудности, к которым приводит прямое применение указанной теории возмущений. Действительно, как будет показано в § 2, теория в форме Бриллюэна — Вигнера является совершенно непригодной по причинам, которые будут рассмотрены ниже, тогда как теория Рэлея — Шредингера (см. гл. 1, § 8, п. 4) при аккуратном и последовательном применении может привести к требуемой пропорциональности полной энергии полному числу частиц N (несмотря на появление нефизических членов, пропорциональных N^2 и т. д.). Действительно, Бракнер [33] показал, что нефизические члены сокращаются в первых четырех порядках, а Голдстоун обобщил этот результат на все порядки теории возмущений.

Ниже мы используем в основном подход Голдстоуна [83] и Хаббарда [99], что автоматически обеспечивает появление в разложении лишь членов, имеющих непосредственный физический смысл. Разумеется, при этом предполагается, что основное состояние взаимодействующей системы можно построить из основного состояния системы свободных частиц с помощью теории возмущений. Такая возможность заведомо не всегда существует, как мы увидим, например, при исследовании сверхпроводящего состояния в гл. 7. В этом случае наличие притягивающего потенциала определенного вида вообще не может быть верно учтено по теории возмущений. Кроме того, подобные опасения существуют даже в отношении некоторых отталкивающих потенциалов (Ван Хов [199]). Причина этих трудностей заключается, грубо говоря, в том, что включение взаимодействия может привести к „пересечению уровней“.

Кроме знака потенциала, применению теории возмущений могут препятствовать и другие его свойства. В частности, наш формализм исключает потенциал „жесткой сердцевины“, поскольку такой потенциал не имеет фурье-образа. Один способ обойти эти трудности указали Бракнер и другие (см. гл. 6), которые вместо борновского приближения для описания двухчастичных столкновений использовали фазовый анализ. В качестве другого примера можно назвать кулоновское взаимодействие (см. гл. 5); хотя фурье-образ для него и существует, но он имеет такую форму, что в разложении для сдвига энергии основного состояния в каждом порядке (кроме первого) возникают расходимости. Эта проблема была полностью решена Гелл-Манном и Бракнером [78], которые следовали более ранней работе Маке [138]. Необходимо упомянуть также случай потенциалов, не обладающих сферической симметрией. Кон и Латтинджер [115] применили теорию возмущений для большого канонического ансамбля при отличных от нуля температурах, когда в силу размытости поверхности Ферми разрешено большее число процессов рассеяния, чем при нуле температуры. Кон и Латтинджер показали, что вклад этих процессов обращается в нуль в пределе $T \rightarrow 0$ только в частном случае сферически симметричных потенциалов. Таким образом, область применимости теории возмущений для систем многих частиц строго не установлена, тем не менее мы изложим формальный аппарат теории, предполагая, что эта область достаточно широка.

Существует два общих подхода к проблеме построения теории возмущений: временной и стационарный. Для задач, не содержащих явной зависимости от времени, более удобен стационарный подход, однако ниже мы отдадим предпочтение

временному подходу ввиду ряда математических преимуществ, которыми он обладает. При изложении этого подхода окажется чрезвычайно удобным формализм вторичного квантования, развитый в гл. 3. В связи с этим следует указать, что ряд авторов использует полевые операторы ψ , тогда как другие предпочитают операторы a , соответствующие набору состояний в виде плоских волн. Разумеется, оба описания эквивалентны, хотя у каждого из них имеются свои преимущества. Вообще можно сказать, что использование ψ -операторов ведет к более компактному и элегантному построению общей теории, тогда как операторы a , по-видимому, более удобны при конкретных вычислениях; выбор здесь является скорее делом вкуса. В дальнейшем мы будем использовать в основном операторы a , но в настоящей главе оба формализма будут развиты параллельно, так как для успешного изучения литературы читателю потребуется знание техники как ψ , так и a -операторов.

Мы можем теперь вплотную приступить к рассмотрению гамильтониана (1.2.1); напомним, что по предположению у двухчастичного потенциала взаимодействия $v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ существует конечный фурье-образ

$$v(\mathbf{k}) = \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Два нижеследующих параграфа (§ 2 и 3) посвящены применению развитой в гл. 1 теории возмущений в ее обычных формах. Как отмечалось выше, при этом получаются неудовлетворительные результаты для систем с очень большим числом частиц; точный характер трудностей будет детально описан ниже. Вследствие этого, начиная с § 4, будет развит другой, более успешный подход, предложенный Голдстоуном и Хаббардом. Поэтому необходимо внимательнее отнестись к деталям вычислений, проведенных после § 2 и 3.

§ 2. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ БРИЛЛЮЭНА – ВИГНЕРА

1. Возмущенная энергия

В гл. 1, § 8, п. 3 был выписан ряд теории возмущений Бриллюэна – Вигнера для энергии основного состояния:

$$\begin{aligned} E = E_0 + \langle \xi_0 | V | \xi_0 \rangle + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{E - H_0} V | \xi_0 \rangle + \\ + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{E - H_0} V \frac{Q}{E - H_0} V | \xi_0 \rangle + \dots \end{aligned} \quad (2.1)$$

Мы хотим изучить зависимость от N последовательных членов разложения (2.1) в статистическом пределе $N \rightarrow \infty$.

$\Omega \rightarrow \infty$ при конечном значении плотности $N/\Omega = \rho$. В гл. 1 было приведено выражение для невозмущенной энергии E_0 [см. (1.3.8)], которая, разумеется, пропорциональна N .

Перейдем теперь к члену первого порядка и запишем явное выражение для него в виде

$$\langle \xi_0 | V | \xi_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i, j} \langle \xi_0 | v(r_i - r_j) | \xi_0 \rangle.$$

Очевидно, матричный элемент взаимодействия v , взятый по N -частичным волновым функциям ξ_0 , сводится после интегрирования по координатам $N - 2$ частиц к двухчастичному матричному элементу типа (1.3.6), так что окончательно получаем

$$\langle \xi_0 | V | \xi_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | v | ij \rangle;$$

здесь матричный элемент $\langle ij | v | ij \rangle$, согласно (1.3.6), пропорционален $1/\Omega$. Суммирование по i, j дает множитель, пропорциональный N^2 ; таким образом матричный элемент $\langle \xi_0 | V | \xi_0 \rangle$ пропорционален $N\rho$. Следующий член в (2.1) можно записать в виде

$$\sum_{a \neq 0} \frac{\langle \xi_0 | V | \xi_a \rangle \langle \xi_a | V | \xi_0 \rangle}{E - E_a}, \quad (2.2)$$

где E_a — энергия состояния $|\xi_a\rangle$, причем $E_0 \neq E_a$, так как по предположению $|\xi_0\rangle$ — невырожденное состояние.

Слагаемое (2.2), выраженное через двухчастичные матричные элементы, имеет вид

$$\frac{1}{4} \sum_{ij'j'} \frac{\langle ij | v | ij' \rangle \langle ij' | v | ij \rangle}{E - E_a},$$

поскольку $|\xi_a\rangle$ может отличаться от $|\xi_0\rangle$ не более чем двумя одночастичными состояниями. Ввиду того что взаимодействие v , согласно (1.3.6), сохраняет полный импульс, суммирование по внутренним импульсам i', j' фактически идет лишь по одному из них; при этом согласно (1.3.3) возникает множитель, пропорциональный Ω . Далее, в результате суммирования по импульсам i, j появляется, как обычно, множитель, пропорциональный N^2 ; каждый из матричных элементов дает вклад, пропорциональный $1/\Omega$, а $1/(E - E_a) \sim 1/N$, поскольку для слагаемых с исчезающими матричными элементами E_a отличается от E_0 членами порядка $o(1)$ (см. ниже). Объединяя эти результаты, сразу получаем

$$\langle \xi_0 | V \frac{Q}{E - H_0} V | \xi_0 \rangle \sim 1.$$

С помощью аналогичных рассуждений можно показать, что члены высших порядков в ряду теории возмущений дают вклады, либо совсем не зависящие от N , либо исчезающие при больших N .

Таким образом, мы приходим к важному выводу: теория возмущений для систем многих частиц дает первый член, пропорциональный N , а каждый из последующих членов независимо от интенсивности возмущения пренебрежимо мал по сравнению с первым. Однако было бы неверно заключить отсюда, что ряд Бриллюэна — Вигнера сходится и необходимо рассматривать лишь первый член. Одна из причин этого, как мы знаем, состоит в том, что в матричном элементе $\langle \xi_0 | V | \xi_0 \rangle$ не учтены динамические межчастичные корреляции, тогда как из физических соображений ясно, что эти корреляции играют существенную роль в сильно взаимодействующих системах. По-видимому, в этом случае дело следует представлять себе так, что, кроме первого члена, в разложении имеется большое число (порядка N) малых членов, которые, грубо говоря, сравнимы по величине, при суммировании эти члены дают конечный вклад в величину энергии, приходящуюся на частицу. Таким образом видно, что теория возмущений в форме Бриллюэна — Вигнера совершенно не приспособлена для применения к системам многих частиц, так как в пределе больших N следовало бы учитывать бесконечно большое число членов.

2. Волновая функция

Выясним далее, является ли волновая функция (1.8.15) лучшим приближением к истинной многочастичной волновой функции, чем невозмущенная волновая функция $|\xi_0\rangle$.

Рассмотрим волновую функцию в первом порядке теории возмущений:

$$|\Psi^{(1)}\rangle = |\xi_0\rangle + \left(\frac{Q}{E - H_0} V \right) |\xi_0\rangle, \quad (2.3)$$

или, явно вводя матричные элементы:

$$|\Psi^{(1)}\rangle = |\xi_0\rangle + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{\langle \xi_\alpha | V | \xi_0 \rangle}{E - E_\alpha} |\xi_\alpha\rangle = |\xi_0\rangle + \sum_{ijij'} \frac{\langle ij' | v | ij \rangle}{E - E_\alpha} |\xi_\alpha\rangle. \quad (2.4)$$

Соотношение (2.4) показывает, что $|\Psi^{(1)}\rangle$ представляет собой суперпозицию состояния $|\xi_0\rangle$, не содержащего возбужденных частиц, и состояний, в которых возбуждена только пара частиц, выбранная всеми возможными способами. Ясно, однако, что в реальной физической ситуации число возбужденных частиц в истинном основном состоянии при больших N должно стре-

миться к бесконечности вместе с N ; поэтому вероятность обнаружить только две возбужденные частицы в системе по существу должна быть близка к нулю. Ввиду этого становится понятно, что нельзя надеяться описать реальную физическую картину, ограничиваясь учетом $\psi^{(1)}$ или вообще $\psi^{(r)}$ при любом конечном r .

Итак, мы снова приходим к выводу, что существенно расходящийся характер ряда теории возмущений в формулировке Бриллюэна — Вигнера для энергии основного состояния наряду с нефизическим поведением возмущенной волновой функции, вычисленной с точностью до любого конечного порядка, делают указанную форму теории возмущений непригодной для изучения систем многих частиц.

§ 3. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ РЭЛЕЯ — ШРЕДИНГЕРА

1. Возмущенная энергия

Теория возмущений в форме Рэлея — Шредингера рассматривалась в гл. 1, § 8, п. 4. В частности, согласно формуле (1.8.18), можно написать

$$E = E_0 + E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)} + \dots,$$

где

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle \xi_0 | V | \xi_0 \rangle, \\ E^{(2)} &= \langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle, \\ E^{(3)} &= \langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} V \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle - E^{(1)} \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle = \\ &= \langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} (V - \langle \xi_0 | V | \xi_0 \rangle) \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Анализ, аналогичный проведенному в § 2 для разложений Бриллюэна — Вигнера, показывает, что, как и ранее, $E_0 \sim N$ и $E^{(1)} \sim N\rho$. Однако

$$E^{(2)} = \sum_{\alpha} \frac{\langle \xi_0 | V | \xi_{\alpha} \rangle \langle \xi_{\alpha} | V | \xi_0 \rangle}{E_0 - E_{\alpha}} = \frac{1}{4} \sum_{ijij'} \frac{\langle ij | v | i'j' \rangle \langle i'j' | v | ij \rangle}{E_0 - E_{\alpha}},$$

поскольку, как и ранее, неисчезающие матричные элементы оператора взаимодействия существуют лишь для N -частичных состояний, в которых различны только уровни, занятые двумя частицами. Таким образом, можно записать явное выражение для знаменателя

$$E_0 - E_{\alpha} = \frac{k_i^2}{2m} + \frac{k_j^2}{2m} - \frac{k_{i'}^2}{2m} - \frac{k_{j'}^2}{2m},$$

из которого видно, что разность $E_0 - E_\alpha$ (а следовательно, и знаменатель в $E^{(2)}$) не зависит от N (в противоположность случаю Бриллюэна — Вигнера). Итак, получаем

$$E^{(2)} \sim N^2 \Omega \frac{1}{\Omega^2} = N \rho.$$

Первый член, входящий в выражение (3.1) для $E^{(3)}$, можно представить в виде

$$\sum_{\alpha\beta} \frac{\langle \xi_0 | V | \xi_\alpha \rangle \langle \xi_\alpha | V | \xi_\beta \rangle \langle \xi_\beta | V | \xi_0 \rangle}{(E_0 - E_\alpha)(E_0 - E_\beta)}. \quad (3.2)$$

Выражение (3.2) отличается от $E^{(2)}$ наличием дополнительного множителя

$$\sum_{\beta} \frac{\langle \xi_\alpha | V | \xi_\beta \rangle}{E_0 - E_\beta},$$

в котором, как и ранее, матричный элемент имеет порядок Ω^{-1} , $E_0 - E_\beta \sim o(1)$, а суммирование дает множитель Ω ; поэтому при $|\xi_\alpha \rangle \neq |\xi_\beta \rangle$ дополнительный множитель есть величина порядка единицы, и соответствующий вклад в $E^{(3)}$ пропорционален $N\rho$.

Путем аналогичных рассуждений можно показать, что каждый член вида

$$\langle \xi_0 | V \left(\frac{QV}{E_0 - H_0} \right)^r | \xi_0 \rangle \quad (r \geq 3)$$

содержит множитель, пропорциональный $N\rho$.

Но мы должны рассмотреть еще и случай $|\xi_\alpha \rangle = |\xi_\beta \rangle$, которому в (3.2) соответствует член

$$\sum_{ijij'kl} \frac{\langle ij | v | i'j' \rangle \langle i'j' | v | ij \rangle \langle kl | v | kl \rangle}{(E_0 - E_\alpha)^2}. \quad (3.3)$$

Анализируя этот член в точности так же, как и выше, находим, что он пропорционален $(N\rho)^2$ и, следовательно, не имеет физического смысла. Однако более пристальное изучение показывает, что второе слагаемое, входящее в выражение (3.1) для $E^{(3)}$, а именно

$$- E^{(1)} \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle,$$

в точности компенсирует вклад нефизического члена, пропорционального N^2 . Доказательство факта полной компенсации требует подробных вычислений, тогда как усмотреть квадратичную зависимость от N второго члена можно без труда.

Мы видим, таким образом, что в третьем (и любом более высоком) порядке теории возмущений Рэлея — Шредингера члены разложения дают в пределе $N \rightarrow \infty$ вклад, растущий как N ; все нефизические члены, пропорциональные N^2 , N^3 и т. д., в точности компенсируют друг друга и в совокупности дают нулевой вклад. Мы не будем углубляться в детали, так как ниже будет дан вывод разложения, явно содержащего лишь члены, пропорциональные N .

Принимая, что указанная компенсация действительно имеет место, мы сразу замечаем, что разложение в форме Рэлея — Шредингера значительно удобнее разложения Бриллюэна — Вигнера, так как оно приводит к значению энергии, приходящейся на одну частицу, не зависящему от размеров системы при больших N .

2. Волновая функция

Волновая функция в первом порядке теории возмущений Рэлея — Шредингера записывается следующим образом:

$$|\psi^{(1)}\rangle = |\xi_0\rangle + \frac{Q}{E_0 - H_0} V |\xi_0\rangle. \quad (3.4)$$

Рассмотрим вариационное приближение для среднего значения энергии в состоянии $|\psi^{(1)}\rangle$, которое имеет вид

$$\frac{\langle \psi^{(1)} | H | \psi^{(1)} \rangle}{\langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle}.$$

Подставляя $|\psi^{(1)}\rangle$ из (3.4), получаем

$$\begin{aligned} & \langle \xi_0 | H | \xi_0 \rangle + 2 \langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} H \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle = \\ & \frac{1 + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle}{=} \\ & = E_0 + E^{(1)} + \left\{ \frac{-E_0 \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle}{1 + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle} + \right. \\ & \left. + \frac{\langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle + E^{(2)} + E^{(3)}}{1 + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle} \right\} + \\ & + \frac{\langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} H_0 \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle}{1 + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle} = \\ & + \frac{\langle \xi_0 | V \frac{Q}{E_0 - H_0} H_0 \frac{Q}{E_0 - H_0} V | \xi_0 \rangle}{1 + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle} = \\ & = E_0 + E^{(1)} + \frac{E^{(2)} + E^{(3)}}{1 + \langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle}. \end{aligned}$$

Здесь, как и ранее, выражение

$$\langle \xi_0 | V \frac{Q}{(E_0 - H_0)^2} V | \xi_0 \rangle = \sum_a \frac{\langle \xi_0 | V | \xi_a \rangle \langle \xi_a | V | \xi_0 \rangle}{(E_0 - E_a)^2}$$

пропорционально $N\rho$ при больших N и потому слагаемое, входящее наряду с $E_0 + E^{(1)}$ в выражение для энергии, есть величина порядка единицы. Таким образом, мы снова приходим к результату вариационного расчета, проведенного с невозмущенной волновой функцией.

Аналогичный результат может быть установлен для волновой функции любого более высокого порядка.

Итак, разложение Рэлея — Шредингера для волновой функции ничем не лучше соответствующего разложения Бриллюэна — Вигнера. Причина в обоих случаях заключается в том, что в любом конечном порядке волновая функция может описывать одновременно лишь конечное число парных возбуждений, тогда как истинная многочастичная волновая функция должна описывать одновременное возбуждение бесконечного числа частиц в пределе $N \rightarrow \infty$.

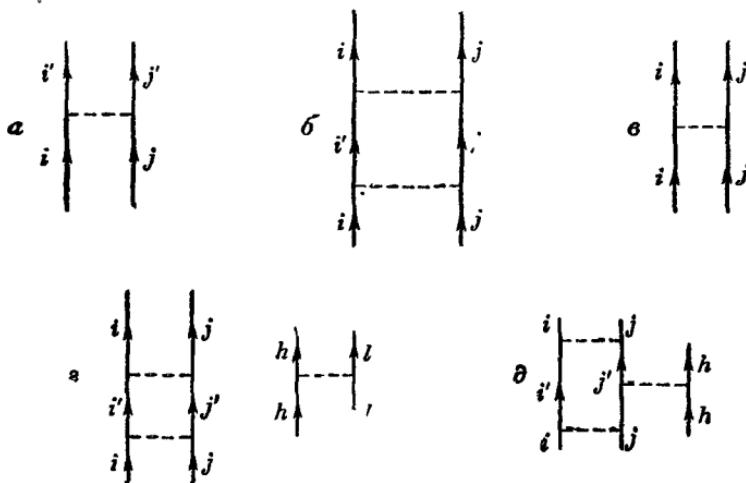
Здесь, естественно, может возникнуть вопрос о том, почему, получая разумные (сходящиеся) разложения для энергий, мы ни в одном случае не можем получить полезных приближений для волновой функции. Ответ на этот парадокс можно найти, если учесть следующие физические соображения. Для точного описания протяженной системы необходимо знать волновую функцию не только локально, но во всей области, и притом с одинаковой точностью; по существу это требование и приводит к необходимости вычисления волновой функции во всех порядках теории возмущений. Напротив, для определения среднего значения локального оператора (а нахождение энергии сводится к вычислению среднего значения двухчастичного потенциала с конечным радиусом действия r_0) необходимо точно знать волновую функцию лишь в малой области с размерами порядка r_0^3 ; такую информацию содержит уже волновая функция Рэлея — Шредингера (или Бриллюэна — Вигнера).

Убедившись в том, что обычная формулировка теории возмущений содержит ряд трудностей, приступим к построению теории возмущений в духе Голдстоуна — Хаббарда. Однако для удобства укажем предварительно простой способ получения разложений Рэлея — Шредингера для энергии с помощью диаграмм. Далее нам потребуется обобщение этих диаграмм на случай учета временной зависимости и неразличимости частиц. Однако введение диаграммной формулировки на этом этапе оправдано, так как оно позволяет подойти к ряду важных понятий в дальнейшем.

3. Диаграммы

Поставим в соответствие фермионам сплошные „вертикальные“ линии, а взаимодействиям — „горизонтальные“ пунктирные линии; тогда фиг. 10, *a* изображает взаимодействие (рассеяние) двух фермионов.

Если обозначить сплошные линии индексами i, j, i', j' , то можно сказать, что два фермиона, находящиеся в состояниях i и j , в результате взаимодействия рассеиваются в состояния i'



Фиг. 10.

и j' . Как правило, i, j, i' и j' представляют собой собственные состояния оператора импульса, а при взаимодействии полный импульс сохраняется. Принято считать, что фиг. 10, *a* соответствует матричному элементу $\langle i'j' | v | ij \rangle$; при этом сплошные линии снабжаются стрелками, как указано на фиг. 10, *a*. Фиг. 10, *b*, например, соответствует двум последовательным актам взаимодействия. В результате первого взаимодействия фермионы из начальных состояний i и j рассеиваются в промежуточные состояния i' и j' , после чего второе взаимодействие переводит их в конечные состояния (которые в рассматриваемом примере совпадают с исходными состояниями). Матричный элемент, соответствующий диаграмме на фиг. 10, *b*, имеет вид

$$\langle ij | v | i'j' \rangle \langle i'j' | v | ij \rangle.$$

Согласно принятым обозначениям, диаграмму, изображенную на фиг. 10, *c* и соответствующую матричному элементу $\langle ij | v | ij \rangle$,

можно истолковать и как диаграмму, представляющую поправку $E^{(1)}$ к энергии основного состояния; для этого следует ввести суммирование по i, j и снабдить все выражение правильным множителем.

Аналогично, принимая соглашение о суммировании (по всем индексам i, j, i' и j') и о введении энергетического знаменателя для промежуточного состояния, можно придать диаграмме на фиг. 10, б смысл поправки $E^{(2)}$ к энергии; указанный энергетический знаменатель представляет собой просто разность энергий (в нашем случае кинетических) промежуточного и начального состояний.

При рассмотрении диаграмм, представляющих поправки высших порядков к энергии, необходимости в новых соглашениях не возникает.

Поправке данного порядка $E^{(r)}$ к энергии соответствует не сколько диаграмм, в каждой из которых имеется r линий взаимодействия, при этом число сплошных линий может изменяться от двух до $2r$; такие диаграммы могут быть как связными, так и несвязными. Пример несвязной диаграммы третьего порядка, соответствующей выражению (3.3), приведен на фиг. 10, г.

С другой стороны, диаграмма на фиг. 10, д является связной диаграммой третьего порядка. Как мы уже видели выше, член, соответствующий диаграмме на фиг. 10, г, дает вклад, пропорциональный N^2 , тогда вклад диаграммы на фиг. 10, д прямо пропорционален числу частиц N .

Как мы постараемся показать в оставшейся части этой главы, теорию возмущений можно сформулировать так, что в ней вообще не возникнут члены, содержащие нефизическую зависимость от N . Поскольку, как легко видеть, лишь несвязные диаграммы дают указанные нефизические вклады, в конечный результат войдут только связные диаграммы. Таким образом, предвосхищая дальнейшее рассмотрение, мы можем написать формулу Голдстоуна

$$E = \langle \xi_0 | V + V \frac{Q}{E_0 - H_0} V + V \frac{Q}{E_0 - H_0} V \frac{Q}{E_0 - H_0} V + \dots | \xi_0 \rangle_{\text{св}}, \quad (3.5)$$

которая отличается от (3.1) тем, что в ней следует учитывать лишь вклады связных диаграмм (на что указывает индекс „св“).

Уместно отметить еще один результат. Вклад каждой из связных диаграмм, которые мы только и будем рассматривать, пропорционален объему системы Ω , умноженному на некоторую степень плотности ρ . Имеется простая связь между числом фермионных линий в диаграмме и степенью плотности ρ : каждая диаграмма, содержащая только две фермионные линии, дает

вклад, пропорциональный $\rho\Omega$. Аналогично, вклад каждой диаграммы, содержащей лишь три фермионных линии, пропорционален $\Omega\rho$ и т. д. (см. задачу 4.4).

§ 4. ВРЕМЕННАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Как отмечалось в § 1, наше рассмотрение теории возмущений для систем многих частиц будет в отличие от предыдущего основано на подходе, явно учитывающем зависимость от времени. Именно, мы стремимся найти решение волнового уравнения (в системе единиц, в которой $\hbar = 1$)

$$H\Phi = i \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \quad (4.1)$$

где

$$H = H_0 + V; \quad (4.2)$$

здесь нет необходимости конкретизировать вид операторов H_0 и V .

Мы будем работать в представлении взаимодействия, которое определяется следующим образом:

$$\Psi = e^{iH_0t}\Phi, \quad V(t) = e^{iH_0t}Ve^{-iH_0t}. \quad (4.3)$$

В этом представлении уравнение (4.1) принимает вид

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = V(t) \Psi. \quad (4.4)$$

Интегрируя (4.4), получаем интегральное уравнение

$$\Psi(t) = \Psi(t_0) - i \int_{t_0}^t V(t') \Psi(t') dt'. \quad (4.5)$$

Применяя к (4.5) итерационную процедуру, приходим к уравнению

$$\Psi(t) = U(t, t_0) \Psi(t_0), \quad (4.6)$$

где

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V(t_n) \dots V(t_1). \quad (4.7)$$

Следуя Дайсону, перепишем оператор (4.7) в более удобной форме

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 P\{V(t_1) \dots V(t_n)\} = \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} U_n(t, t_0); \end{aligned} \quad (4.8)$$

операция P определена для любого набора операторов $O_i(t_i)$ следующим образом:

$$P\{O_1(t_1) \dots O_n(t_n)\} = O_{a_1}(t_{a_1}) \dots O_{a_n}(t_{a_n}) \quad (t_{a_1} > t_{a_2} > \dots > t_{a_n}). \quad (4.9)$$

Оператор P часто называют оператором хронологического упорядочения. Смысл перехода от (4.7) к (4.8) состоит в том, что вводится общий для всех интегралов верхний предел t , правда, при этом слегка усложняется подынтегральное выражение. Формальное доказательство эквивалентности выражений (4.7) и (4.8) можно построить по индукции.

Матрица U , определенная выражением (4.7), играет центральную роль при построении теории; приведем поэтому основные свойства этой матрицы:

$$U(t, t_0) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0}, \quad (4.10)$$

$$U(t_1, t_3) U(t_3, t_2) = U(t_1, t_2) \text{ (правило умножения),} \quad (4.11)$$

$$U^\dagger(t_1, t_2) = U(t_2, t_1) \text{ (эрмитовость),} \quad (4.12)$$

$$U(t_1, t_2) U^\dagger(t_1, t_2) = 1 \text{ (унитарность).} \quad (4.13)$$

Соотношение (4.10) получается непосредственно, если убедиться сначала в том, что функция

$$\Phi(t) = e^{-iH(t-t_0)} \Phi(t_0)$$

удовлетворяет уравнению Шредингера и граничному условию при $t = t_0$. Тогда с учетом (4.3) имеем

$$\Psi(t) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} \Phi(t_0) = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0} \Psi(t_0);$$

сравнивая последнее выражение с (4.6), получаем (4.10). Произведение экспонент в (4.10) нельзя упростить ввиду того, что операторы, стоящие в показателях экспонент, вообще говоря, не коммутируют. Остальные три равенства (4.11) – (4.13) легко получаются из представления (4.10) для матрицы U .

§ 5. АДИАБАТИЧЕСКАЯ ГИПОТЕЗА

Основная идея временного подхода состоит в том, что рассматривается первоначально невзаимодействующая система, в которой затем „включается“ взаимодействие и спустя бесконечно большой промежуток времени достигается новое стационарное состояние с учетом взаимодействия. Математически это означает, что если, например, $\Psi(-\infty)$ – основное состояние системы невзаимодействующих частиц, входящее в (4.6), то искомое основное состояние при наличии взаимодействия имеет вид

$$\Psi(0) = U(0, -\infty) \Psi(-\infty). \quad (5.1)$$

Однако такая формулировка не вполне удовлетворительна. Если бы мы действительно применили в дальнейшем (5.1) для нахождения $\Psi(0)$, нам пришлось бы в конечном счете столкнуться с трудностями, связанными с появлением расходящихся интегралов; поэтому необходимо проанализировать ситуацию более тщательно. Приемлемый выход был указан Гелл-Манном и Лоу [79]; с физической точки зрения он сводится к тому, что взаимодействие следует вводить с помощью адиабатического включения. Если это включение производится достаточно медленно, то вполне правдоподобно считать, что устанавливается истинное основное состояние.

Математически это выражается в том, что определяемое соотношением (5.1) состояние $\Psi(0)$ является собственной функцией H при условии, что выражение для $\Psi(0)$ понимается в следующем смысле:

$$\Psi(0) = \lim_{\alpha \rightarrow +0} U_\alpha(0, -\infty) \Psi(-\infty), \quad (5.2)$$

где

$$U_\alpha(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 P\{V_\alpha(t_1) \dots V_\alpha(t_n)\} \quad (5.3)$$

и

$$V_\alpha(t) = V(t) e^{-\alpha|t|}. \quad (5.4)$$

Это утверждение в принципе доказывается просто. Именно, следует подействовать оператором $H_0 - E_0$ на функцию (5.2). Тогда после некоторых перестановок и перехода к пределу $\alpha \rightarrow 0$ получаем в результате снова функцию $\Psi(0)$ (5.2), умноженную на константу, равную, как показано ниже, сдвигу энергии основного состояния ΔE . Однако для практического проведения указанных вычислений требуется довольно искусная техника; мы отсылаем читателя за ее деталями к приложению к статье Гелл-Манна и Лоу [79] или к развернутому рассмотрению в книге Нозьера ([156], стр. 176). Мы не будем, как правило, явно вводить α , но в затруднительных случаях следует помнить, что именно выражение (5.2) [а не (5.1)] является строгой формулировкой.

Следует заметить, что для положительных времен t выражение (5.4) соответствует адиабатическому выключению взаимодействия, в результате чего в пределе $t = +\infty$ система вновь приходит в состояние невзаимодействующих частиц. В настоящей главе нет необходимости рассматривать положительные времена, но в теории функций Грина в гл. 10 нам понадобится вся временная ось.

Используя формулы (5.2) – (5.4) для возмущенной волновой функции, можно написать следующее выражение для сдвига энергии основного состояния:

$$\Delta E = \frac{\langle \Psi(-\infty) | V | \Psi(0) \rangle}{\langle \Psi(-\infty) | \Psi(0) \rangle} = \frac{\langle \Psi(-\infty) | VU(0, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle}{\langle \Psi(-\infty) | U(0, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle}. \quad (5.5)$$

Фактически этот результат аналогичен формулам (1.8.4) и (1.8.7) для сдвига уровня.

Выражение (5.5) очень удобно представить в ином виде:

$$\Delta E = \left[i \frac{\partial}{\partial t} \ln \langle \Psi(-\infty) | U(t, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle \right]_{t=0}. \quad (5.6)$$

Эквивалентность выражений (5.5) и (5.6) следует из того, что

$$\begin{aligned} & \langle \Psi(-\infty) | U(t, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle \times \\ & \times i \frac{\partial}{\partial t} \ln \langle \Psi(-\infty) | U(t, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle = \\ & = i \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi(-\infty) | U(t, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle = \\ & = \langle \Psi(-\infty) | i \frac{\partial}{\partial t} U(t, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle = \langle \Psi(-\infty) | i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) \rangle, \end{aligned}$$

причем последнее равенство вытекает из соотношения (4.6). Используя уравнение (4.4), мы можем сразу записать

$$\langle \Psi(-\infty) | i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(-\infty) | V(t) | \Psi(t) \rangle.$$

Здесь правая часть эквивалентна выражению

$$\langle \Psi(-\infty) | V(t) U(t, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle,$$

в чем можно убедиться путем повторного использования соотношения (4.6). Полагая $t = 0$, получаем искомый результат.

Наша дальнейшая цель состоит в получении для ΔE разложений в ряд по степеням константы связи на основе формулы (5.6). Отсюда ясно, почему так важно изучение матрицы U и в особенности ее среднего значения в состоянии $\Psi(-\infty)$.

§ 6. ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЕ ОБСУЖДЕНИЕ ДИАГРАММ ДЛЯ МАТРИЦЫ U

Теперь следует конкретизировать вид операторов H_0 и V в (4.2); выберем для дальнейшего рассмотрения гамильтониан, свойства которого обсуждались в гл. 3 [см. замечания перед

формулой (3.9.6)]:

$$H_0 = \sum K a_K^\dagger a_K = -\frac{1}{2} \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) \nabla_r^2 \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (6.1)$$

и

$$\begin{aligned} V = \frac{1}{2} \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle a_K^\dagger a_L^\dagger a_M a_N = \\ = \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \psi^\dagger(\mathbf{x}_1) \psi^\dagger(\mathbf{x}_2) v(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_1). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Согласно (4.8), в матрицу U входят произведения операторов V [точнее, операторов $V(t)$ в представлении взаимодействия]; если учесть выражение (6.2) для V , то станет ясно, что математическая структура U очень сложна. Нам следует обсудить этот вопрос во всех подробностях; анализу матрицы U и развитию соответствующих методов его проведения будет посвящена остальная часть данной главы. По-видимому, уместно дать здесь общее описание метода, который может быть использован, подобно тому, как мы дали в § 3, п. 3 описание графического представления членов разложения Рэлея — Шредингера для энергии.

Грубо говоря, мы хотим представить член типа

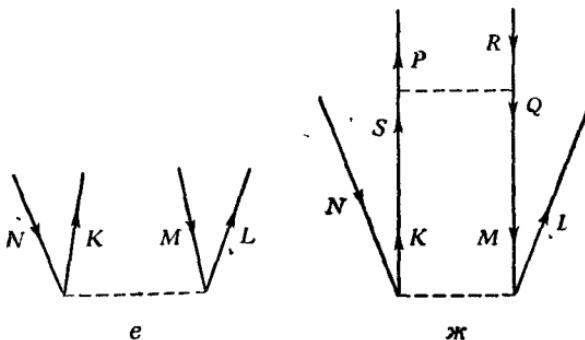
$$\langle KL | v | NM \rangle a_K^\dagger a_L^\dagger a_M a_N, \quad (6.3)$$

входящий в (6.2), с помощью соответствующей диаграммы. Стого говоря, мы должны перевести член (6.3) в представление взаимодействия (см. ниже § 7), а затем обобщить графический метод, развитый в § 3, п. 3, на случай учета временной зависимости. Правила построения таких диаграмм детально сформулированы в § 7, п. 1, однако здесь полезно отметить (не уточняя, являются ли состояния K, L, M, N частичными или дырочными), что можно построить набор диаграмм, одна из которых имеет вид фиг. 10, *a*. Как мы увидим ниже, оператор (6.3), действуя, согласно (5.1), на $|\Psi(-\infty)\rangle$, приводит к диаграмме, изображенной на фиг. 10, *e*. Используя уже сейчас введенное в § 7, п. 1 условие о том, что ось времен направлена снизу вверх, можно сказать, что оператор (6.3) (или, точнее, его зависящая от времени форма) соответствует двум дыркам N и M и двум частицам K и L , порожденным из вакуумного состояния $|\Psi(-\infty)\rangle$. Из вида разложения (4.8) ясно, что при анализе матрицы U следует рассматривать произведения членов типа (6.3); в связи с этим полезно привести еще один простой пример графического представления члена второго порядка. Рассмотрим диаграмму на фиг. 10, *ж*; наличие в ней двух линий взаимодействия ясно указывает на то, что

это диаграмма второго порядка; ее нижняя часть в точности совпадает с диаграммой на фиг. 10, *e* и, следовательно, соответствует члену вида (6.3). Однако верхняя часть этой диаграммы соответствует оператору

$$\langle PQ|v|SR\rangle a_P^+ a_Q^+ a_R a_S \quad (6.4)$$

и, таким образом, полная диаграмма возникает как произведение членов (6.3) и (6.4). Эти рассуждения допускают обобщение на любой порядок теории возмущений, но произвольный



Фиг. 10. (Продолжение)

член в U имеет столь сложную структуру, что, кроме рассмотренных диаграмм Фейнмана, нам потребуются также другие методы вычислений.

Итак, в оставшейся части главы осуществляется следующая программа. В § 7 выписывается в явном виде член n -го порядка разложения U , откуда сразу становится ясной необходимость более мощных методов учета хронологического упорядочения. Теорема Вика, содержащая требуемый результат, дана (в ограниченной формулировке) в § 10 и в более общем виде — в § 14. С помощью теоремы Вика можно изучить члены ряда для U ; соответствующее рассмотрение первого порядка теории возмущений проводится в § 11, а общий случай рассматривается в § 15. На окончательном этапе вычислений в соответствии с (4.8) должно проводиться интегрирование по временам; эта процедура рассматривается в § 17. Окончательный результат состоит в формулировке теоремы о разложении по связным диаграммам в той форме, которую следовало ожидать на основании анализа разложений Рэлея — Шредингера в § 3, п. 3.

§ 7. ВРЕМЕННОЙ ФОРМАЛИЗМ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ЧАСТИЦ—ДЫРОК

Нам следует изучить основной элемент, входящий в выражение для матрицы U , — оператор $V(t)$, определяемый соотношением (4.3). Рассмотрим этот оператор взаимодействия более пристально. Используя (6.2), запишем его в форме

$$V(t_{12}) = \frac{1}{2} \sum_{KLMN} \langle KL|v|NM\rangle a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) = \\ = \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \psi^\dagger(1) \psi^\dagger(2) v(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \psi(2) \psi(1) \quad (t_1 = t_2 = t_{12}), \quad (7.1)$$

где

$$\psi(j) = e^{iH_0 t_j} \psi(\mathbf{x}_j) e^{-iH_0 t_j}, \quad a_K(t) = e^{iH_0 t} a_K e^{-iH_0 t}; \quad (7.2)$$

следует обратить внимание на обозначение временной зависимости в (7.2), так как оно будет нередко применяться в дальнейшем.

Часто оказывается удобным использовать формальные выражения (7.2) для $\psi(j)$ и $a_K(t)$; их можно, однако, переписать в другой форме, например

$$\psi(j) = \sum \Phi_K(\mathbf{x}_j) a_K(t_j), \quad a_K(t) = e^{-i\epsilon_K t} a_K. \quad (7.3)$$

Второе из выражений (7.3) можно получить, рассматривая действие его левой и правой частей на произвольный детерминант, состоящий из плоских волн, тогда как первое из них получается при замене функции $\psi(\mathbf{x}_j)$ в (7.2) ее выражением (3.7.1).

Подставим (7.1) в (4.8). Тогда член n -го порядка в матрице U принимает вид

$$U_n(t, t_0) = \frac{(-i)^n}{2^n n!} \int_{t_0}^t dt_{2n-1} \int_{t_0}^t \dots \int_{t_0}^t dt_{12} \times \\ \times \sum_{KLMN \dots XYZT} \langle KL|v|NM\rangle \langle PQ|v|SR\rangle \dots \langle XY|v|TZ\rangle \times \\ \times P[a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})] [a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) a_R(t_{34}) a_S(t_{34})] \times \\ \times \dots [a_X^\dagger(t_{2n-1} \dots t_{2n}) a_Y^\dagger(t_{2n-1} \dots t_{2n}) a_Z(t_{2n-1} \dots t_{2n}) a_T(t_{2n-1} \dots t_{2n})] = \\ = \frac{(-i)^n}{2^n n!} \int_{t_0}^t dt_{2n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_{12} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 v(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \int d\mathbf{x}_3 d\mathbf{x}_4 \dots \times \\ \times \int d\mathbf{x}_{2n-1} d\mathbf{x}_{2n} v(\mathbf{r}_{2n-1} \mathbf{r}_{2n}) P[\psi^\dagger(1) \psi^\dagger(2) \psi(2) \psi(1)] \times \\ \times [\psi^\dagger(3) \psi^\dagger(4) \psi(4) \psi(3)] \dots [\psi^\dagger(2n-1) \psi^\dagger(2n) \psi(2n) \psi(2n-1)]; \quad (7.4)$$

здесь оператор P , определенный выше соотношением (4.9), действует на произведения четверок операторов с совпадающими временами. Например, если $t_{34} > t_{12}$, то

$$P [\psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1)] [\psi^+(3) \psi^+(4) \psi(4) \psi(3)] = \\ = [\psi^+(3) \psi^+(4) \psi(4) \psi(3)] [\psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1)].$$

Выражение (7.4) подчеркивает важную роль, которую играют зависящие от времени операторы ψ и их компоненты при анализе U -матрицы. Поэтому, прежде чем закончить этот параграф, мы изучим указанные величины несколько более подробно. В основном мы будем стремиться к обобщению представления частиц — дырок, развитого в гл. 3, § 9, на случай учета зависимости от времени. Это потребуется нам впоследствии при изучении выражения (7.4).

Воспользуемся формулой (3.9.1) и заменим операторы a операторами b в выражении (7.3) для ψ . Тогда получим [ср. (3.9.6) и (3.9.7)]

$$\psi(1) = \sum_{k < k_f} \varphi_K(x_1) a_K(t_1) + \sum_{k > k_f} \varphi_K(x_1) a_K(t_1) = \quad (7.5)$$

$$= \sum_{k < k_f} \varphi_K(x_1) b_K^+(t_1) + \sum_{k > k_f} \varphi_K(x_1) b_K(t_1) = \quad (7.6)$$

$$= \psi_+(1) + \psi_-(1) \quad (7.7)$$

и

$$\psi^+(1) = \sum_{k < k_f} \varphi_K^*(x_1) a_K^+(t_1) + \sum_{k > k_f} \varphi_K^*(x_1) a_K^+(t_1) = \quad (7.8)$$

$$= \sum_{k < k_f} \varphi_K^*(x_1) b_K(t_1) + \sum_{k > k_f} \varphi_K^*(x_1) b_K^+(t_1) = \quad (7.9)$$

$$= \psi_-^+(1) + \psi_+^+(1). \quad (7.10)$$

Операторы $b_K(t)$ определены так, что

$$b_K(t) = \begin{cases} a_K^+(t) = e^{i\epsilon_K t} a_K^+ & (k < k_f), \\ a_K(t) = e^{-i\epsilon_K t} a_K & (k > k_f), \end{cases} \quad (7.11)$$

причем последнее равенство следует из (7.3). Соотношения (7.5) — (7.11) переходят в (3.9.1), (3.9.6) и (3.9.7), если положить в них $t = 0$.

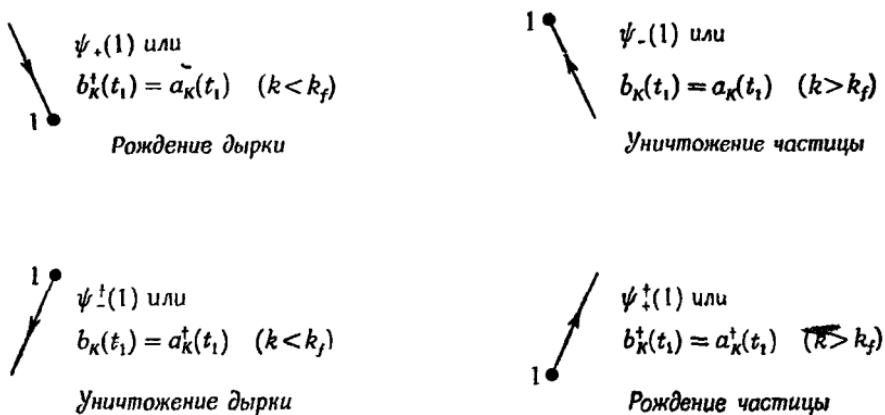
1. Правила для диаграмм Фейнмана

Уместно приступить сейчас к точной формулировке правил построения диаграмм Фейнмана, которые были весьма вольно введены по аналогии с диаграммами стационарной теории воз-

мущений. Выше мы рассмотрели диаграммы, которые насчитывают не менее четырех фермионных линий, поставленных в соответствие операторам a . Подчеркнем, что совершенно аналогичным образом можно построить диаграммы для ψ -операторов.

Ранее использованные составные диаграммы были построены из элементов, изображенных на фиг. 11 и дающих, как нетрудно заметить, эквивалентное описание в терминах операторов a , b или ψ .

Следует подчеркнуть, что, хотя рассмотрение диаграмм не является совершенно неизбежным при построении теории возмущений, оно тем не менее обеспечивает глубокое понимание



Фиг. 11

физического смысла теории. Более того, при изложении результатов этой главы мы широко используем именно диаграммную технику.

Для понимания графического представления важно уяснить следующие правила:

1) Как всегда [см. (7.2) и (7.3)], целые числа 1, 2, ... соответствуют пространственно-временным точкам. Ось времени у диаграмм направлена снизу вверх на странице. Таким образом, можно говорить (вслед за Фейнманом) о „линиях дырок“ ($k < k_f$), направленных сверху вниз, т. е. соответствующих обратному движению во времени, и „линиях частиц“ ($k > k_f$), соответствующих прямому движению во времени и направленных снизу вверх. Горизонтальная ось должна представлять собой на диаграммах трехмерное пространство координат. Косые направления линий несущественны — важно лишь их временное направление.

2) Линии диаграммы, соответствующие операторам $\psi^+(1)$ и $a_K^\dagger(t_1)$, направлены от пространственно-временной точки 1; наоборот, линии, соответствующие операторам $\psi(1)$ и $a_K(t_1)$, направлены к точке 1.

Линии рождения частиц или дырок, соответствующие операторам $\psi_+^+(1)$, $\psi_-(1)$ и $b_K^\dagger(t_1)$, расположены сверху от точки 1; линии уничтожения, соответствующие операторам $\psi_-^+(1)$, $\psi_-(1)$ и $b_K(t_1)$, — снизу от нее.

Имея в виду это правило, можно изобразить совокупность линий на фиг. 11 значительно более экономно. Так, при использовании полевых операторов первая диаграмма на фиг. 11 приобретает вид  ; при использовании компонент полевых операторов следует лишь снабдить стрелку еще индексом состояния K .

2. Свойства операторов, зависящих от времени

1) Напомним еще раз [см. замечание после формулы (3.9.7)], что мы приняли следующие обозначения:

$$\psi_+^+ = (\psi^+)_+, \quad \psi_-^+ = (\psi^+)_-. \quad (7.12)$$

2) Из стационарного формализма переходит ряд других свойств с очевидной модификацией, в частности перестановочные соотношения

$$\begin{aligned} a_K(t) a_{K'}^\dagger(t') + a_{K'}^\dagger(t') a_K(t) &= \delta_{KK'} e^{-i\epsilon_K(t-t')}, \\ b_K(t) b_{K'}^\dagger(t') + b_{K'}^\dagger(t') b_K(t) &= \delta_{KK'} e^{\mp i\epsilon_K(t-t')} \quad (k \geq k_f); \end{aligned} \quad (7.13)$$

все остальные антисимметрические (для всех типов операторов a или b) равны нулю. Для зависящих от времени операторов уничтожения ψ_- , ψ_-^+ и b_K сохраняется также свойство вакуумного состояния

$$\psi_- |\Psi(-\infty)\rangle = 0 = \psi_-^+ |\Psi(-\infty)\rangle; \quad b_K |\Psi(-\infty)\rangle = 0. \quad (7.14)$$

Теперь мы уже можем заняться хронологически упорядоченным произведением операторов $V(t)$. Напомним, что наша основная цель состоит в получении сдвига энергии основного состояния ΔE , а для этого, согласно (5.6), нужно знать среднее значение оператора U по основному состоянию невзаимодействующих частиц. Для вычисления вклада члена n -го порядка

$$\langle \Psi(-\infty) | U_n(t, -\infty) | \Psi(-\infty) \rangle$$

мы должны уметь вычислять среднее значение P -произведений, входящих в (7.4), и это подводит нас к идеи о нормальном, или N -произведении.

§ 8. НОРМАЛЬНЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ

Для начала рассмотрим в качестве примера операторную величину $a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3)$. Заменяя операторы a операторами b , согласно (7.11), и используя затем соотношения антикоммутации, установленные в § 7, п. 2, легко убедиться в справедливости следующих равенств:

$$\begin{aligned} a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= b_{K_3}^\dagger(t_3)b_{K_1}(t_1)b_{K_2}(t_2) - \delta_{K_1K_3}e^{-i\epsilon_{K_1}(t_1-t_3)}b_{K_2}(t_2) + \\ &\quad + \delta_{K_2K_3}e^{-i\epsilon_{K_2}(t_2-t_3)}b_{K_1}(t_1) \quad (k_1, k_2, k_3 > k_f); \\ a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= b_{K_1}(t_1)b_{K_2}(t_2)b_{K_3}(t_3) \quad (k_1, k_2 > k_f; k_3 < k_f); \\ a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= b_{K_2}^\dagger(t_2)b_{K_3}^\dagger(t_3)b_{K_1}(t_1) - \delta_{K_1K_3}e^{-i\epsilon_{K_1}(t_1-t_3)}b_{K_2}^\dagger(t_2) \\ &\quad (k_1, k_3 > k_f; k_2 < k_f), \\ a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= -b_{K_2}^\dagger(t_2)b_{K_1}(t_1)b_{K_3}(t_3) \quad (k_1 > k_f; k_2, k_3 < k_f); \\ a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= -b_{K_1}^\dagger(t_1)b_{K_3}^\dagger(t_3)b_{K_2}(t_2) + \delta_{K_2K_3}e^{-i\epsilon_{K_2}(t_2-t_3)}b_{K_1}(t_1) \\ &\quad (k_1 < k_f; k_2, k_3 > k_f); \\ a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= b_{K_1}^\dagger(t_1)b_{K_2}(t_2)b_{K_3}(t_3) \quad (k_1, k_3 < k_f; k_2 > k_f); \\ a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= b_{K_1}^\dagger(t_1)b_{K_2}^\dagger(t_2)b_{K_3}^\dagger(t_3) \quad (k_1, k_2 < k_f; k_3 > k_f); \\ a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^\dagger(t_3) &= b_{K_1}^\dagger(t_1)b_{K_3}^\dagger(t_3)b_{K_2}(t_2) \quad (k_1, k_2, k_3 < k_f). \end{aligned} \quad (8.1)$$

Свойства различных матричных элементов исходного произведения легко получаются из (8.1), если вспомнить, что $b_K|\Psi(-\infty)\rangle = 0 = \langle\Psi(-\infty)|b_K^\dagger$ для всех K . Например, поскольку каждый член в (8.1) содержит нечетное число операторов, среднее значение (8.1) по основному состоянию, т. е. $|\Psi(-\infty)\rangle$, равно нулю. Из второго операторного слагаемого в первом из равенств (8.1) видно, что матричный элемент, вычисленный при исследовании бра- и кет-векторов $\langle\Psi(-\infty)|b_{K_2}^\dagger(t_2)$ и $|b_{K_2}^\dagger(t_2)\rangle$, имеет следующее значение:

$$-\delta_{K_1K_3}e^{-i\epsilon_{K_1}(t_1-t_3)},$$

если состояния K_1 , K_2 и K_3 расположены выше поверхности Ферми. Аналогичным образом вид других членов в (8.1)

указывает, какие из матричных элементов отличны от нуля, и позволяет установить значения этих матричных элементов.

Обратимся теперь к рассмотрению матричных элементов оператора U по состоянию $|\Psi(-\infty)\rangle$. Очевидно, что в высоких порядках применить указанную в (8.1) процедуру практически невозможно, и следует использовать более мощный аппарат. Именно в этом заключается основная причина введения нормальных произведений, к определению которых мы и переходим.

Предположим, что имеется простое произведение зависящих от времени операторов a^+ и a ; оно может быть описано в терминах частиц и дырок, если заменить все a и a^+ на b и b^+ , согласно (7.11). Нормальное произведение для полученного выражения строится путем перегруппировки операторов, в результате которой все операторы b^+ оказываются слева от операторов b ; все выражение снабжается соответствующим знаковым множителем $(-1)^p$, где p — число произведенных перестановок сомножителей.

В качестве простого примера укажем, что при $k_1, k_3 > k_f$, $k_2 < k_f$ имеем

$$\begin{aligned} N(a_{K_1}(t_1)a_{K_2}(t_2)a_{K_3}^+(t_3)) &= N(b_{K_1}(t_1)b_{K_2}^+(t_2)b_{K_3}^+(t_3)) = \\ &= (-1)^2 b_{K_1}^+(t_2)b_{K_3}^+(t_3)b_{K_1}(t_1) = (-1)^2 a_{K_1}(t_2)a_{K_3}^+(t_3)a_{K_1}^+(t_1). \end{aligned} \quad (8.2)$$

Отметим следующие дополнительные моменты, связанные с понятием нормального произведения:

1) Вычисление нормального произведения выполняется так, как если бы каждая пара фермионных операторов антисиммутировала; это означает, в частности, что $N(XY) = -N(YX)$. Нормальные произведения в (8.1) получаются, если опустить множители с δ -функциями.

2) Определение нормального произведения внутренне согласовано, т. е. конечный результат не зависит от последовательности операций приведения. Это свойство обусловлено тем, что операторы b^+ , равно как и операторы b , антисиммутируют между собой. Так, например, в (8.2) можно было бы, предположим, написать $(-1)^p b_{K_3}^+(t_3)b_{K_2}^+(t_2)b_{K_1}(t_1)$ и мы получили бы совершенно верный результат, если учесть, что в этом случае $p = 3$.

3) Развитый формализм заведомо применим к произведениям не зависящих от времени операторов a , так как при определении нормального произведения время не является существенной переменной.

4) Наконец, наиболее важное свойство любого нормального произведения состоит в том, что его среднее значение по ваку-

умному состоянию равно нулю (см., однако, ниже замечание в § 9).

Если развивать формализм U -матрицы в терминах полевых операторов ψ , то удобно определить нормальные произведения по отношению к линейным комбинациям операторов a и a^\dagger . Пусть A, B, C, \dots обозначают простые произведения операторов a и a^\dagger , а λ, μ, \dots — скаляры (c -числа). Тогда нормальное произведение для линейной комбинации определяется следующим образом:

$$N(\lambda A + \mu B) = \lambda N(A) + \mu N(B). \quad (8.3)$$

Аналогично можно построить нормальное произведение и для более сложных выражений, например

$$N\{A(B+C)\} = N(AB+AC) = N(AB) + N(AC) \quad (8.4)$$

и вообще

$$N\left\{\sum_i A_i \sum_j B_j\right\} = \sum_{ij} N(A_i B_j). \quad (8.5)$$

Используя (8.5) и свойство 1 нормального произведения, получаем

$$N(XY) = -N(YX), \quad (8.6)$$

где X и Y представляют теперь линейные комбинации простых операторов.

Определение (8.3) применимо, в частности, к операторам $\psi, \psi^\dagger, \psi_\pm, \psi_\pm^\dagger$. Выражения вида

$$N\{\psi^\dagger(1)\psi(2)\psi(3)\psi^\dagger(4)\psi^\dagger(5)\dots\}$$

можно вычислять теперь детально как в терминах операторов a , так и с помощью расщепления на операторы ψ_\pm . Например,

$$\begin{aligned} N\{\psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)\psi(2)\psi(1)\} &= N[(\psi_+^\dagger(1) + \psi_-^\dagger(1))\psi^\dagger(2)\psi(2)\psi(1)] = \\ &= N\{\psi_+^\dagger(1)\psi^\dagger(2)\psi(2)\psi(1)\} + N\{\psi_-^\dagger(1)\psi^\dagger(2)\psi(2)\psi(1)\} \end{aligned} \quad (8.7)$$

и т. д.

Производя вычисления с операторами ψ и ψ^\dagger , полезно помнить, что первоначальное определение нормального произведения и его четыре свойства сохраняются, если в каждом простом произведении мы рассматриваем операторы ψ_+^\dagger и ψ_+ как b^\dagger , а операторы ψ_-^\dagger и ψ_- — соответственно как b . Например,

$$\begin{aligned} N\{\psi^\dagger(2)\psi(1)\} &= N\{\psi_+^\dagger(2)\psi_+(1) + \psi_+^\dagger(2)\psi_-(1) + \psi_-^\dagger(2)\psi_+(1) + \\ &\quad + \psi_-^\dagger(2)\psi_-(1)\} = \psi_+^\dagger(2)\psi_+(1) + \psi_+^\dagger(2)\psi_-(1) - \\ &\quad - \psi_+(1)\psi_-^\dagger(2) + \psi_-^\dagger(2)\psi_-(1). \end{aligned} \quad (8.8)$$

§ 9. СПАРИВАНИЯ

Выше было показано, что среднее значение нормального произведения по состоянию $|\Psi(-\infty)\rangle$ равно нулю. Этот факт наводит на мысль о том, что удобно ввести новую величину \underline{AB} , определив ее равенством

$$\underline{AB} = N(AB) + \underline{A}\underline{B}, \quad (9.1)$$

где A и B — любые операторы, для которых определено понятие нормального произведения. Беря среднее значение (9.1) по вакуумному состоянию $|\Psi(-\infty)\rangle$, находим

$$\langle \underline{AB} \rangle = \langle \underline{A}\underline{B} \rangle. \quad (9.2)$$

Величина \underline{AB} называется спариванием операторов A и B (см., например, [32]). Во всех представляющих интерес приложениях, рассмотренных ниже, $\underline{A}\underline{B}$ оказывается c -числом, поэтому можно опустить угловые скобки в правой части (9.2). Используя (7.13) и определение нормального произведения, легко убедиться, например, в том, что

$$\begin{aligned} \underline{a}_K(t) \underline{a}_{K'}^\dagger(t') &= \delta_{KK'} e^{-i\epsilon_{K(t-t')}} \quad (k, k' > k_f), \\ \underline{a}_K^\dagger(t) \underline{a}_{K'}(t') &= \delta_{KK'} e^{i\epsilon_{K(t-t')}} \quad (k, k' < k_f), \end{aligned} \quad (9.3)$$

все остальные спаривания операторов a и a^\dagger равны нулю. В этом примере спаривания \underline{AB} являются c -числами и равны, согласно (9.2), средним значениям $\langle AB \rangle$.

Рассмотрим очевидное обобщение определения (9.1) на случай, когда один из операторов выражается линейной комбинацией других операторов. Тогда можно, например, записать

$$\underline{A(B+C)} = A(B+C) - N\{A(B+C)\};$$

раскрывая правую часть с помощью (8.4), находим

$$\begin{aligned} \underline{AB} + \underline{AC} - N(\underline{AB}) - N(\underline{AC}) &= \{AB - N(AB)\} + \{AC - N(AC)\} = \\ &= \underline{AB} + \underline{AC}. \end{aligned} \quad (9.4)$$

Ясно, что результат (9.4) допускает обобщение

$$\underline{(\Sigma A_i)} (\Sigma B_j) = \Sigma \underline{A_i} B_j. \quad (9.5)$$

1. Примеры

Рассмотрим применение полученных результатов на двух примерах.

1) Для операторов ψ_{\pm} , ψ_{\pm}^+ можно построить шестнадцать спариваний, но лишь два из них (они рассмотрены ниже) отличны от нуля. Вводя обозначение $\varphi_K(1) = \varphi_K(x_1) \exp(-i \epsilon_K t)$, получаем

$$\begin{aligned} \underline{\psi_{-}(1)} \psi_{+}^{\dagger}(2) &= \sum_{k_1, k_2 > k_f} \varphi_{K_1}(x_1) \varphi_{K_2}^*(x_2) \underline{a_{K_1}(t_1)} a_{K_2}^{\dagger}(t_2) = \\ &= \sum_{k > k_f} \varphi_K(1) \varphi_K^*(2), \end{aligned} \quad (9.6)$$

$$\begin{aligned} \underline{\psi_{+}^{\dagger}(1)} \psi_{+}(2) &= \sum_{k_1, k_2 < k_f} \varphi_{K_1}^*(x_1) \varphi_{K_2}(x_2) \underline{a_{K_1}^{\dagger}(t_1)} a_{K_2}(t_2) = \\ &= \sum_{k < k_f} \varphi_K^*(1) \varphi_K(2). \end{aligned} \quad (9.7)$$

2) Для операторов ψ и ψ^+ можно построить четыре спаривания, из которых снова лишь два отличны от нуля. На основе предыдущего примера имеем

$$\begin{aligned} \underline{\psi(1)} \psi^{\dagger}(2) &= \underline{\psi_{+}(1)} \psi_{+}^{\dagger}(2) + \underline{\psi_{+}(1)} \psi_{-}^{\dagger}(2) + \underline{\psi_{-}(1)} \psi_{+}^{\dagger}(2) + \underline{\psi_{-}(1)} \psi_{-}^{\dagger}(2) = \\ &= 0 + 0 + \sum_{k > k_f} \varphi_K(1) \varphi_K^*(2) 0. \end{aligned}$$

Аналогично спаривание $\underline{\psi^{\dagger}(1)} \psi(2)$ имеет вид

$$\underline{\psi^{\dagger}(1)} \psi(2) = \sum_{k < k_f} \varphi_K^*(1) \varphi_K(2). \quad (9.8)$$

Спаривания $\underline{A} B$ по-прежнему являются с-числами и потому, в силу (9.2), равны $\langle AB \rangle$.

2. Нормальные произведения, содержащие спаривания

Определим нормальные произведения, содержащие спаривания, следующим образом:

$$N(\underbrace{PQRST \dots XYZ}) = \pm \underbrace{QSRY \dots N(PT \dots XZ)}. \quad (9.9)$$

Спаривания удаляются из-под символа нормального произведения, и все выражение (9.9) получает знак: верхний, если при удалении спариваний переставляется четное число операторов, и нижний, если это число нечетное (порядок удаления спариваний не влияет на знак). Для полностью спаренных нормальных произведений примем, что $N(\underbrace{AB}) = \underbrace{AB}$. В этом состоит ограничение, о котором упоминалось в правиле 4 в § 8, п. 2: среднее значение такого нормального произведения отлично от нуля.

Имеем, например,

$$\begin{aligned} N(\underbrace{ABCDE}) &= -N(\underbrace{ACBDE}) = -\underbrace{ACN(BDE)} = +\underbrace{ACN(DBE)} - \\ &= -\underbrace{ACN(DEB)} = -\underbrace{ACDEN(B)}. \end{aligned}$$

Приведем еще один результат, полезный для работы с полевыми операторами, но не обязательный при использовании их компонент:

$$N(\sum_k A_1^k \sum_l A_2^l \sum_m A_3^m \dots \sum_p A_r^p) = \sum_{klm \dots p} N(A_1^k \underbrace{A_2^l A_3^m \dots A_r^p}). \quad (9.10)$$

Равенство (9.10) доказывается так. По определению (9.9), левую часть (9.10) можно записать в виде

$$\pm (\sum_l A_2^l \sum_p A_r^p) (\underbrace{\dots}) N(\sum_k A_1^k \sum_m A_3^m \dots).$$

Используем далее равенства (9.5) и (8.5), указывающие, как найти спаривания и нормальные произведения сумм операторов. Тогда рассматриваемое выражение принимает вид

$$\begin{aligned} &\pm \sum_{lp} A_2^l A_r^p \sum_{km} \dots \sum_{km} N(A_1^k A_3^m \dots) = \\ &= \pm \underbrace{A_2^l A_r^p}_{\underbrace{\dots}} \dots N(A_1^k A_3^m \dots), \end{aligned}$$

где сумма берется по всем нижним индексам. Используя теперь (9.9), введем все спаривания под знак N -произведения, при этом получим правую часть (9.10).

Как пример развитого формализма рассмотрим нормальное произведение для $\psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1)$. Его можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 & N(\underbrace{\psi^+(1) \psi^+(2)}_{\psi^+(1)} \underbrace{\psi(2)}_{\psi^+(2) + \psi^-(2)} \underbrace{\psi(1)}_{\psi_+(1) + \psi_-(1)}) = \\
 & = N(\underbrace{\psi^+(1)}_{\psi^+(1)} [\underbrace{\psi^+(2) + \psi^-(2)}_{\psi^+(2)}] \underbrace{\psi(2)}_{\psi_+(2) + \psi_-(2)} [\underbrace{\psi_+(1) + \psi_-(1)}_{\psi_+(1)}]) = \\
 & = N(\underbrace{\psi^+(1)}_{\psi^+(1)} \underbrace{\psi^+(2)}_{\psi^+(2)} \underbrace{\psi(2)}_{\psi_+(2)} \underbrace{\psi_+(1)}_{\psi_+(1)}) + N(\underbrace{\psi^+(1)}_{\psi^+(1)} \underbrace{\psi^+(2)}_{\psi^+(2)} \underbrace{\psi(2)}_{\psi_-(2)} \underbrace{\psi_-(1)}_{\psi_-(1)}) + \\
 & + N(\underbrace{\psi^+(1)}_{\psi^+(1)} \underbrace{\psi^-(2)}_{\psi^-(2)} \underbrace{\psi(2)}_{\psi_-(2)} \underbrace{\psi_+(1)}_{\psi_+(1)}) + \\
 & + N(\underbrace{\psi^+(1)}_{\psi^+(1)} \underbrace{\psi^-(2)}_{\psi^-(2)} \underbrace{\psi(2)}_{\psi_-(2)} \underbrace{\psi_-(1)}_{\psi_-(1)}). \tag{9.11}
 \end{aligned}$$

Этот пример является типичным для анализа, который будет приведен ниже.

§ 10. ТЕОРЕМА ВИКА ДЛЯ ПРОСТЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ

Часто бывает полезно переписать данное операторное выражение в форме нормального произведения¹⁾. Цель теоремы Вика состоит в том, чтобы указать наиболее систематический и компактный способ получения такой записи. Нам уже известно решение для простого произведения двух операторов a или ϕ , оно дается равенством (9.1), которое как раз и является содержанием теоремы Вика для этого простого случая. Следует обобщить теперь результат (9.1) на случай произведения, состоящего из большого числа операторов.

Теорема Вика утверждает следующее: пусть A_1, A_2, \dots, A_n представляет собой набор операторов a, b, a^\dagger и b^\dagger или их

¹⁾ Точнее, данное операторное выражение следует представить в виде линейной комбинации произведений операторов b и b^\dagger , в каждом из которых все операторы b^\dagger стоят слева от операторов b [примером такой записи служит (8.1)].

линейных комбинаций; тогда

$$\begin{aligned}
 A_1 A_2 \dots A_n &= N(A_1 A_2 \dots A_n) + \text{(Все члены, не содержащие спариваний; такой член только один.)} \\
 &+ \bar{N}(\underline{A_1} A_2 \dots A_n) + \text{(Все члены, содержащие одно спаривание; число таких членов } C_n^2 \text{)} \\
 &+ N(\underline{\underline{A_1}} A_2 \dots A_n) + \dots \text{(Все члены, содержащие два спаривания; число таких членов } \frac{1}{2} C_n^2 C_{n-2}^2 \text{)} \\
 &+ \dots +
 \end{aligned}$$

+ Все полностью спаренные члены. (Такие члены возникают, лишь если n — четное число.) (10.1)

Ввиду того что среднее значение любого N -произведения по основному состоянию невзаимодействующих частиц равно нулю, теорема Вика (10.1) утверждает, в частности, что указанное среднее значение для простого произведения равно сумме всех полностью спаренных членов. Правая часть (10.1) представляет собой нормальную форму произведения A_1, A_2, \dots, A_n . Доказательство этой важной теоремы дано в приложении II.

Теперь мы можем указать более компактную форму записи нашего иллюстративного примера (8.1). Применяя (10.1), имеем

$$\begin{aligned}
 a_{K_1}(t_1) a_{K_2}(t_2) a_{K_3}^\dagger(t_3) &= \\
 &= N\{a_{K_1}(t_1) a_{K_2}(t_2) a_{K_3}^\dagger(t_3)\} + N\{\underline{a_{K_1}(t_1)} a_{K_2}(t_2) a_{K_3}^\dagger(t_3)\} + \\
 &\quad + N\{\underline{a_{K_1}(t_1)} a_{K_2}(t_2) \underline{a_{K_3}^\dagger(t_3)}\} + N\{a_{K_1}(t_1) \underline{a_{K_2}(t_2)} \underline{a_{K_3}^\dagger(t_3)}\} = \\
 &= N\{a_{K_1}(t_1) a_{K_2}(t_2) a_{K_3}^\dagger(t_3)\} + 0 - \\
 &\quad - \underline{a_{K_1}(t_1)} \underline{a_{K_3}^\dagger(t_3)} a_{K_2}(t_2) + \underline{a_{K_2}(t_2)} \underline{a_{K_3}^\dagger(t_3)} a_{K_1}(t_1).
 \end{aligned} \tag{10.2}$$

С помощью формулы (9.9) спаривания удаляются из-под знака N -произведения; второе слагаемое обращается в нуль, потому что отличны от нуля лишь спаривания, указанные в (9.3). Используя для каждого фиксированного набора индексов состояния K определения (7.11) и (9.3), можно, разумеется, получить соответствующую строку равенства (8.1), однако обычно формализм (10.2) применяется для обобщенного представления информации, заключенной в громоздких выражениях типа (8.1).

§ 11. ПЕРВЫЙ ПОРЯДОК ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Проанализируем с помощью теоремы Вика первый отличный от нуля член в разложении (4.8) матрицы U . Полагая $n = 1$ в (7.4), имеем

$$\begin{aligned} U_1(t, t_0) &= -\frac{i}{2} \int_{t_0}^t dt_{12} \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}), \\ &= -\frac{i}{2} \int_{t_0}^t dt_{12} \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 v(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1). \end{aligned} \quad (11.1)$$

Операторы в подынтегральных выражениях следует сразу переписать в форме нормального произведения. Используя теорему Вика, получаем (для удобства мы не указываем явно переменной t_{12})

$$\begin{aligned} a_K^\dagger a_L^\dagger a_M^\dagger a_N &= N(a_K^\dagger a_L^\dagger a_M a_N) + \\ &\quad + N(\underbrace{a_K^\dagger a_L^\dagger a_M}_{\square} a_N) + N(a_K^\dagger \underbrace{a_L^\dagger a_M}_{\square} a_N) + \\ &\quad + N(\underbrace{a_K^\dagger a_L^\dagger}_{\square} a_M a_N) + N(a_K^\dagger \underbrace{a_L^\dagger}_{\square} a_M a_N) + \\ &\quad + N(\underbrace{a_K^\dagger a_L^\dagger}_{\square} a_M a_N) + \\ &\quad + N(\underbrace{a_K^\dagger a_L^\dagger}_{\square} a_M a_N). \end{aligned} \quad (11.2)$$

Совершенно аналогичным образом находим

$$\begin{aligned} \psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1) &= N(\psi^+(1) \psi^+(2) \psi(2) \psi(1)) + \\ &\quad + N(\underbrace{\psi^+(1) \psi^+(2)}_{\square} \psi(2) \psi(1)) + N(\psi^+(1) \underbrace{\psi^+(2)}_{\square} \psi(2) \psi(1)) + \\ &\quad + N(\underbrace{\psi^+(1) \psi^+(2)}_{\square} \psi(2) \psi(1)) + N(\psi^+(1) \underbrace{\psi^+(2)}_{\square} \psi(2) \psi(1)) + \\ &\quad + N(\underbrace{\psi^+(1) \psi^+(2)}_{\square} \psi(2) \psi(1)) + N(\underbrace{\psi^+(1) \psi^+(2)}_{\square} \psi(2) \psi(1)). \end{aligned} \quad (11.3)$$

В (11.2) мы опустили члены типа $N(a_K^\dagger a_L^\dagger a_M a_N)$, которые возникли бы при непосредственном применении теоремы Вика, ввиду того что они тождественно равны нулю, так как

$\underline{a}^\dagger \underline{a}^\dagger = 0 = \underline{a} \underline{a}$ [см. (9.3) и дальнейшие замечания]; аналогичное утверждение справедливо и для (11.3) (см. пример 2в, § 9, п. 1).

Перейдем теперь к графическому изображению различных членов в (11.2) и (11.3), причем сделаем это самым подробным образом, поскольку произвольные диаграммы n -го порядка строятся систематическим образом из диаграмм первого порядка. Для построения диаграмм, соответствующих (11.3), необходимо сперва расщепить каждый неспаренный оператор ψ или ψ^\dagger на составляющие его операторы ψ_\pm или ψ_\pm^\dagger , как это сделано в (9.11); аналогичная процедура для (11.2) состоит в том, чтобы указать положения состояний K , L , M и N относительно поверхности Ферми.

1. Графическое представление

Рассмотрим диаграммы, соответствующие слагаемым правой части в (11.2) и (11.3).

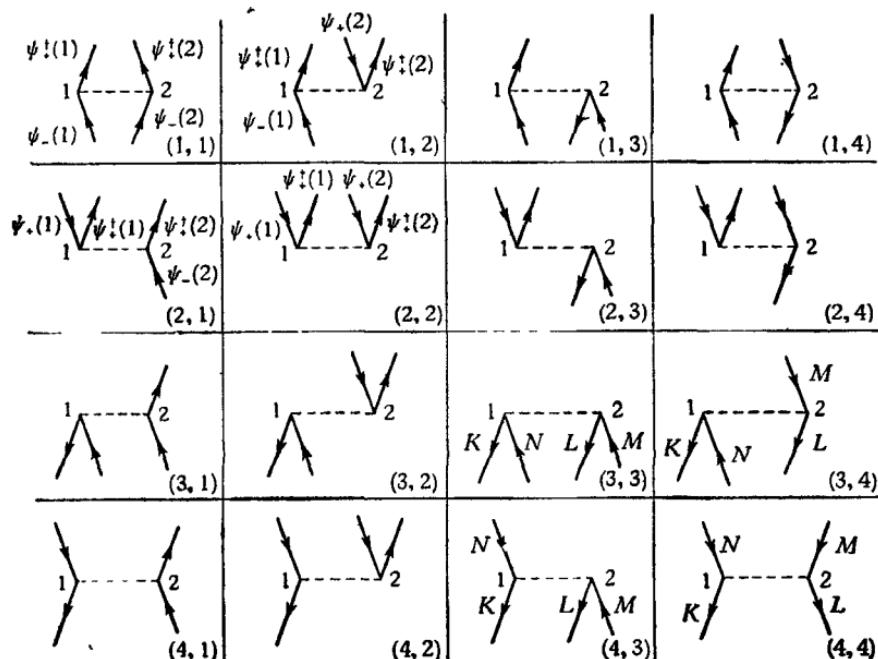
1) *Члены без спариваний.* Каждому из первых слагаемых в (11.2) и (11.3) соответствует 16 различных случаев. Для (11.2) это явствует из того, что в произведении $N(a_K^\dagger a_L^\dagger a_M a_N)$ каждый индекс может обозначать состояние, лежащее либо внутри, либо вне сферы Ферми. В случае (11.3) наличие 16 вариантов диаграммы первого порядка наглядно вытекает из следующей записи N -произведения:

$$N(\psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)\psi(2)\psi(1)) = N\{(\psi_+^\dagger(1)+\psi_-^\dagger(1))(\psi_+^\dagger(2)+\psi_-^\dagger(2))(\psi_+(2)+\psi_-(2))(\psi_+(1)+\psi_-(1))\}. \quad (11.4)$$

Применяя соглашение об обозначениях, введенное на фиг. 11, можно представить графически вклады шестнадцати типов, которые показаны на фиг. 12. Линиям диаграмм можно ставить в соответствие либо полевые операторы, либо их компоненты. Типичными примерами первого способа изображения служат диаграммы (1,1), (1,2), (2,1) и (2,2), а второго — (3,3), (3,4), (4,3) и (4,4). Заметим следующее:

а) Пунктирная линия соответствует взаимодействию в (11.1); ее часто называют вершиной (вертексом) диаграммы. Эта линия — горизонтальная, так как $t_1 = t_2$. Такое взаимодействие называют мгновенным; говорят также о рассеянии частиц вследствие взаимодействия. Так, например, диаграмма (3,4) представляет две дырки (K и L) и одну частицу (N) при $t < t_{12}$. В момент времени t_{12} дырка K и частица N аннигилируют друг с другом, тогда как дырка L становится при $t > t_{12}$ дыркой M .

б) Ряд характерных свойств диаграмм на фиг. 12 вытекает из специального вида произведения операторов в (11.3) с учетом обозначений, принятых на фиг. 11. Поскольку каждая линия, соответствующая ψ^+ , направлена от вершины, а линия, соответствующая ψ^- , — к вершине, то из записи (11.4) следует, что в каждый из концов вершины входит и выходит по одной



Фиг. 12 Графическое представление членов первого порядка в U -матрице (Диаграммы, не содержащие спаривания.)

линии. При описании в терминах компонент полевых операторов индексы K и N приписываются соответственно выходящей и входящей в точке 1 линиям (то же относится к индексам L и M в точке 2). Представляют ли эти индексы дырки или частицы, зависит от направления линий по отношению к оси времени: частицам соответствует направление вдоль этой оси, дыркам — обратное направление.

2) Члены с одним спариванием. Для удобства разделим члены с одним спариванием на две группы — прямые и обменные члены. Прямыми членами соответствуют второе и третье слагаемые в (11.2) и (11.3); рассмотрим, для конкретности, второе слагаемое в (11.3) (в этом примере обнаруживается упоминавшееся в конце § 1 удобство операторов ψ для общих теоретических выкладок).

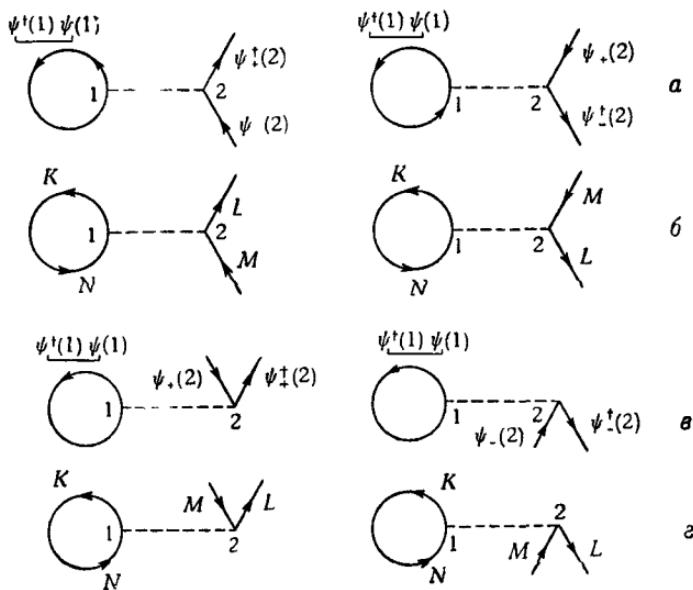
Именно, рассмотрим выражение

$$N(\underbrace{\psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)}_{\text{---}}\psi(2)\psi(1)) = \underbrace{\psi^\dagger(1)\psi(1)}_{\text{---}}N(\psi^\dagger(2)\psi(2)), \quad (11.5)$$

где

$$\begin{aligned} N(\psi^\dagger(2)\psi(2)) &= N\{(\psi_+^\dagger(2) + \psi_-^\dagger(2))(\psi_+(2) + \psi_-(2))\} = \\ &= N(\psi_+^\dagger(2)\psi_+(2) + \psi_+^\dagger(2)\psi_-(2) + \psi_-^\dagger(2)\psi_+(2) + \psi_-^\dagger(2)\psi_-(2)) = \\ &= N(\psi_+^\dagger(2)\psi_+(2)) + N(\underline{\psi_+^\dagger(2)\psi_-(2)}) + N(\underline{\psi_-^\dagger(2)\psi_+(2)}) + \\ &+ N(\underline{\psi_-^\dagger(2)\psi_-(2)}) = \psi_+^\dagger(2)\psi_+(2) + \underline{\psi_+^\dagger(2)\psi_-(2)} - \underline{\psi_+(\2)\psi_-^\dagger(2)} + \\ &+ \psi_-^\dagger(2)\psi_-(2). \quad (11.6) \end{aligned}$$

Отличный от нуля вклад дают лишь два подчеркнутых члена; соответствующие им диаграммы приведены на фиг. 13, а. Два



Ф и г. 13.

других члена в (11.6), которым соответствуют диаграммы на фиг. 13, в, дают нулевой вклад в U_1 и, как будет вскоре показано, могут быть совсем опущены.

Если бы мы начали изучать второе слагаемое в (11.2), нам пришлось бы явно указывать положение различных импульсов относительно поверхности Ферми. Но ход рассмотрения по

существу остался бы прежним, т. е. мы опять пришли бы к диаграммам на фиг. 13, б и г.

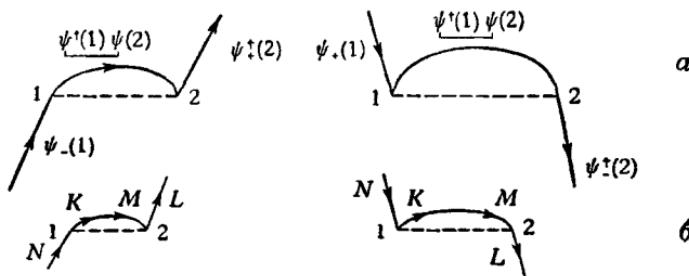
Чтобы убедиться, что диаграммы фиг. 13, в и г дают нулевой вклад, достаточно лишь заметить, что эти диаграммы приводят в (11.1) к матричным элементам $\langle KL|v|KM\rangle$ с $l > k_f$ и $m < k_f$ (или наоборот). Как показывает уравнение (1.3.6), для потенциалов взаимодействия, при которых полный импульс сохраняется, все члены подобного типа равны нулю.



Фиг. 14.

Аналогичные рассуждения справедливы для третьего слагаемого в (11.2) [или в (11.3)]; единственное различие состоит в том, что точки 1 и 2 меняются ролями. Диаграммы фиг. 13 можно истолковать следующим образом:

а) Диаграмма на фиг. 13, а или б соответствует рассеянию частицы (дырки) на частице фона (частицы внутри ферми-поверхности); использование замкнутой петли для графического изображения операции спаривания не лишено, таким образом,



Фиг. 15.

определенного физического смысла. Более того, такое изображение находится в соответствии с введенным ниже понятием свертки для разных времен. Направление, указываемое стрелкой на линии петли, не имеет значения, как это иллюстрируется фиг. 14.

То обстоятельство, что диаграммы на фиг. 13, в и г дают нулевой вклад, с физической точки зрения интерпретируется как подтверждение невозможности создать (или уничтожить) одну пару частица – дырка, удовлетворив одновременно требованию сохранения импульса.

б) В каждый из концов вершины входит и выходит по одной линии; расстановка индексов на фиг. 12 и 13 совпадает.

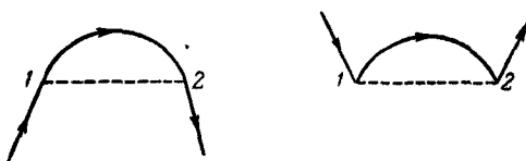
Займемся теперь так называемым обменным вкладом, который дают четвертое и пятое слагаемые в (11.2) и (11.3). Четвертое слагаемое в (11.3) имеет вид

$$\underbrace{N(\psi^+(1)\psi^+(2)\psi(2)\psi(1))}_{\text{ }} = -\underbrace{\psi^+(1)\psi^-(2)}_{\text{ }} N(\psi^+(2)\psi^-(1)), \quad (11.7)$$

где [см. (11.6)]

$$\begin{aligned} N(\psi^+(2)\psi^-(1)) = & \psi_+^+(2)\psi_+(1) + \underline{\psi_+^+(2)\psi_-(1)} - \underline{\psi_+(1)\psi_-^+(2)} + \\ & + \psi_-^+(2)\psi_-(1). \end{aligned} \quad (11.8)$$

В этом выражении отличный от нуля вклад дают лишь два подчеркнутых члена; соответствующие им диаграммы изображены на фиг. 15, а. Два оставшихся члена в (11.8), изображенные на фиг. 16, дают нулевой вклад в U_1 и потому могут



Фиг. 16.

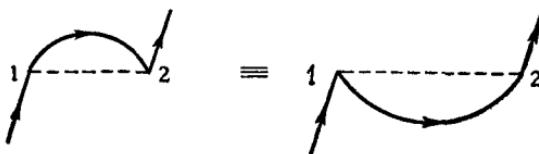
быть опущены. Аргументация здесь аналогична использованной для „прямых“ диаграмм фиг. 13, в и г, которые, как было показано, не дают вклада: диаграммы на фиг. 16 отвечают матричным элементам, для которых не сохраняется импульс.

Анализ четвертого слагаемого в (11.2) производится совершенно аналогично. Вклад в U_1 дают лишь диаграммы фиг. 15, б, тогда как диаграммы фиг. 16 дают нулевой вклад в случае потенциалов, сохраняющих полный импульс.

Для пятого слагаемого в (11.2) или (11.3) сохраняют силу все приведенные выше соображения, меняются ролями лишь точки 1 и 2. Заметим, что с физической точки зрения диаграммы, изображенные на фиг. 15, соответствуют уничтожению частицы (дырки) в точке 1 (2) и одновременному рождению частицы (дырки) в точке 2 (1). Как показано на фиг. 17, выпуклость линии спаривания не имеет особого значения; ее времененная зависимость, строго говоря, должна была бы представляться горизонтальной линией, совпадающей с пунктирной

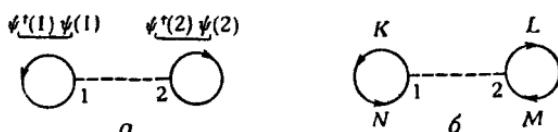
линией вершины, но в целях удобства и ясности такое обозначение не используется.

3) *Полностью спаренные члены.* Полностью спаренные члены представлены шестым и седьмым слагаемыми в (11.2) и (11.3); их снова удобно классифицировать в терминах прямых и обменных вкладов.



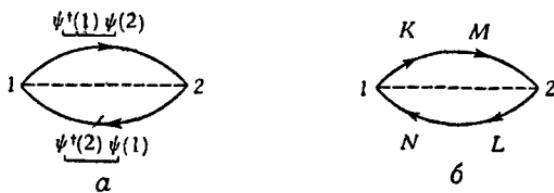
Фиг. 17.

Прямой вклад дается шестым слагаемым в (11.2) и (11.3); соответствующие диаграммы представлены на фиг. 18.



Фиг. 18.

Обменным вкладам соответствуют последние слагаемые в (11.2) и (11.3); диаграммы для них изображены на фиг. 19. Заметим, что диаграмма фиг. 18 отвечает статическому взаимодействию, а диаграмма фиг. 19 — обмену между двумя частицами фона.



Фиг. 19.

Чтобы выйти за рамки теории возмущений первого порядка, развитой на основе теоремы Вика для простых произведений, оказывается чрезвычайно удобным обобщить эту теорему на случай учета хронологического упорядочения. Правда, такое обобщение не является существенно необходимым, и Голдстоун в своей оригинальной работе избежал введения произведений,

упорядоченных во времени. Однако это понятие нашло широкое применение в теории многих частиц; кроме того, на его основе в § 13 вводится важное понятие хронологического спаривания (см. также связь с функциями Грина в гл. 10).

§ 12. ХРОНОЛОГИЧЕСКИ УПОРЯДОЧЕННЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ

Основная трудность при вычислении членов высших порядков в матрице U состоит в приведении операторной части подынтегрального выражения к форме нормальных произведений. Анализ, проведенный в первом порядке теории возмущений, позволяет ожидать, что эту процедуру в общем случае можно выполнить с помощью теоремы Вика. Мы приходим, таким образом, к обобщению этой теоремы на случай P -произведений. Выше мы уже рассматривали простейшую форму теоремы Вика для простого произведения [выражение (9.1)]; найдем аналог этого результата для P -произведения двух операторов. Используя (9.1) и (8.6), можно написать

$$A(t_1)B(t_2) = N(A(t_1)B(t_2)) + \underline{A(t_1)}B(t_2), \quad (12.1)$$

$$\begin{aligned} B(t_2)A(t_1) &= N(B(t_2)A(t_1)) + \underline{B(t_2)}\underline{A(t_1)} = \\ &= -N(A(t_1)B(t_2)) + \underline{B(t_2)}\underline{A(t_1)}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Таким образом, искомый аналог формулы (9.1) имеет вид

$$P(A(t_1)B(t_2)) = \pm N(A(t_1)B(t_2)) + \begin{cases} \underline{A(t_1)}B(t_2) & (t_1 \geq t_2), \\ \underline{B(t_2)}\underline{A(t_1)} & \end{cases} \quad (12.3)$$

Для простых произведений обобщением выражения (9.1) является выражение (10.1). Ясно, что при попытке аналогичным образом обобщить выражения (12.3) возникает ряд неудобств из-за наличия переменного знака в N -произведении. Чтобы избежать трудностей, возникающих в связи со знакопеременным характером выражения (12.3), определим вместо оператора P , введенного в (7.4), оператор T -произведения; в результате получим удобную формулировку теоремы Вика. Ниже этот вывод приведен во всех подробностях. Сейчас достаточно заметить, что в частном случае (12.3) оказывается $P = \pm T (t_1 \geq t_2)$ и, таким образом,

$$T(A(t_1)B(t_2)) = N(A(t_1)B(t_2)) + \overline{A(t_1)B(t_2)}, \quad (12.4)$$

где

$$\overline{A(t_1) B(t_2)} = \begin{cases} \overline{A(t_1)} B(t_2) & (t_1 > t_2) \\ -\overline{B(t_2)} A(t_1) & (t_2 > t_1) \end{cases}. \quad (12.5)$$

После этих общих соображений приступим к более формальному общему выводу; он будет весьма близко следовать теории нормальных произведений и спариваний, так что второстепенным деталям будет уделено несколько меньше внимания: они должны быть ясны из предыдущего изложения.

Обозначим через $A_1(t_1) A_2(t_2) \dots$ произведение зависящих от времени операторов a, a^+, b и b^+ и определим для него хронологическую (упорядоченную во времени) форму равенством

$$T(A_1(t_1) A_2(t_2) \dots) = (-1)^P A_{a_1}(t_{a_1}) A_{a_2}(t_{a_2}) \dots \quad (t_{a_1} > t_{a_2} > \dots), \quad (12.6)$$

где P — число перестановок, необходимых для того, чтобы перейти от произведения $A_1(t_1) A_2(t_2) \dots$ к произведению $A_{a_1}(t_{a_1}) A_{a_2}(t_{a_2}) \dots$.

Можно обобщить это определение, распространив его на случай линейных комбинаций простых произведений следующим образом. Пусть A, B, C, \dots — простые произведения рассмотренного выше типа и λ, μ, ν, \dots представляют собой c -числа. Тогда можно записать

$$T(\lambda A + \mu B) = \lambda T(A) + \mu T(B), \quad (12.7)$$

откуда следует, например,

$$T\{A(B+C)\} = T(AB+AC) = T(AB) + T(AC). \quad (12.8)$$

§ 13. ХРОНОЛОГИЧЕСКИЕ СПАРИВАНИЯ

Пусть $A(t_A)$ и $B(t_B)$ — операторы, для которых определены нормальное и хронологическое произведения. Назовем тогда хронологическим спариванием (сверткой) величину \overline{AB} , определенную уравнением

$$T(AB) = N(AB) + \overline{AB}. \quad (13.1)$$

Вспоминая, что среднее значение нормального произведения по невозмущенному основному состоянию равно нулю, вновь получаем

$$\langle \overline{AB} \rangle = \langle T(AB) \rangle. \quad (13.2)$$

Поскольку все хронологические спаривания оказываются с-числами, можно, как и ранее, опустить угловые скобки в левой части (13.2). Заметим, что между простым и хронологическим спариванием существует простая связь. Так, если $t_A > t_B$ и, следовательно, $T(AB) = AB$, то

$$\overline{AB} = \underline{AB} \quad (t_A > t_B). \quad (13.3)$$

если же $t_B > t_A$, то $T(AB) = -BA = -N(BA) = \underline{-BA} = N(AB) - \underline{BA}$,

и, согласно определению (13.1), имеем

$$\overline{AB} = -\underline{BA} \quad (t_B > t_A). \quad (13.4)$$

Разумеется, эти уравнения по существу эквивалентны (12.5), но они имеют несколько более общий смысл; заметим, что, согласно (13.3) и (13.4), при любом соотношении времени t_A и t_B выполняется равенство

$$\overline{AB} = -\overline{BA}. \quad (13.5)$$

Для хронологических спариваний справедлив также закон, выражаемый равенством (9.4), а именно

$$\begin{aligned} \overline{A(B+C)} &= T\{A(B+C)\} - N\{A(B+C)\} = \\ &= T(AB) + T(AC) - N(AB) - N(AC) = \\ &= \{T(AB) - N(AB)\} + \{T(AC) - N(AC)\} = \\ &= \overline{AB} + \overline{AC}. \end{aligned} \quad (13.6)$$

или в более общем виде

$$\left(\sum_i \overline{A_i}\right) \left(\sum_j \overline{B_j}\right) = \sum_{ij} \overline{A_i B_j}. \quad (13.7)$$

Нормальные произведения, содержащие хронологические спаривания, определяются соотношением, аналогичным (9.9)

$$N(P\overline{Q}\overline{R}\overline{S}\dots\overline{X}\overline{Y}\overline{Z}) = \pm \overline{Q}\overline{S}\overline{R}\overline{Y}\dots N(P\overline{T}\dots\overline{X}\overline{Z}), \quad (13.8)$$

знак в (13.8) устанавливается согласно правилу, сформулированному выше. Имеет место также теорема, аналогичная (9.10):

$$N(\sum_k \overbrace{A_1^k}^{\square} \sum_l \overbrace{A_2^l}^{\square} \sum_m \overbrace{A_3^m}^{\square} \dots \sum_p \overbrace{A_r^p}^{\square}) = \sum_{k, l, m, \dots, p} N(A_1^k A_2^l A_3^m \dots A_r^p). \quad (13.9)$$

Используя этот результат, можно производить разложения, аналогичные разложению (9.11).

1. Примеры хронологических спариваний операторов

Проиллюстрируем полученные выше формулы на нескольких примерах.

1) Выше мы видели, как записываются хронологические спаривания через простые спаривания [см. (13.3) и (13.4)]. Тогда, используя пример, рассмотренный после соотношения (9.2) для простых спариваний, можно записать все хронологические спаривания между операторами a и a^\dagger . При этом получается следующий результат:

$$\overbrace{a_K(t)}^{\square} \overbrace{a_{K'}^\dagger(t')}^{\square} = \begin{cases} \delta_{KK'} e^{-i\epsilon_K(t-t')} & (t > t' \text{ и } k, k' > k_f) \\ -\delta_{KK'} e^{-i\epsilon_K(t-t')} & (t' > t \text{ и } k, k' < k_f) \end{cases}. \quad (13.10)$$

Все остальные хронологические спаривания типа $\overbrace{a^\dagger a}^{\square}$ равны нулю; для хронологических спариваний типа $\overbrace{a^\dagger a}^{\square}$ результат получается сразу, если учесть (13.5). Кроме того, как и ранее [см. замечание после соотношения (9.3)],

$$\overbrace{a_K^\dagger(t)}^{\square} \overbrace{a_{K'}^\dagger(t')}^{\square} = 0 = \overbrace{a_K(t)}^{\square} \overbrace{a_{K'}(t')}^{\square}. \quad (13.11)$$

2) Используя уравнения (13.3), (13.4) и результаты, полученные в § 9, п. 1, находим

$$\overbrace{\psi(1)}^{\square} \overbrace{\psi^*(2)}^{\square} = \begin{cases} \sum_{k>k_f} \varphi_K(1) \varphi_K^*(2) & (t_1 > t_2) \\ -\sum_{k<k_f} \varphi_K(1) \varphi_K^*(2) & (t_2 > t_1) \end{cases} \quad (13.12)$$

$$\overbrace{\psi^*(1)}^{\square} \overbrace{\psi^*(2)}^{\square} = \begin{cases} \sum_{k<k_f} \varphi_K^*(1) \varphi_K(2) & (t_1 > t_2) \\ -\sum_{k>k_f} \varphi_K^*(1) \varphi_K(2) & (t_2 > t_1) \end{cases} \quad (13.13)$$

и

$$\overline{\psi^\dagger(1)\psi^\dagger(2)} = 0 = \overline{\psi(1)\psi(2)}. \quad (13.14)$$

Следует отметить, что хронологическое спаривание для любой пары полевых операторов A и B является c -числом и потому в соответствии с (13.2)

$$\overline{AB} = \langle T(AB) \rangle \quad (13.15)$$

В силу причин, которые мы обсудим в гл. 10, определенные здесь хронологические спаривания могут быть названы невозмущенными (свободными) функциями Грина, или невозмущенными пропагаторами. Точнее, принимая во внимание (13.10), запишем

$$\overline{a_K(t)a_{K'}^\dagger(t')} = \langle T(a_K(t)a_{K'}^\dagger(t')) \rangle = -iG_0(K, t - t')\delta_{KK'}. \quad (13.16)$$

Ввиду важной роли функции G_0 выпишем ее в явном виде полностью

$$G_0(K, t - t') = \begin{cases} \pm i \exp \{-i\epsilon_K(t - t')\} & (+\text{при } t > t' \text{ и } k > k_f, \\ & -\text{при } t < t' \text{ и } k < k_f), \\ 0 & \text{в других случаях.} \end{cases} \quad (13.17)$$

§ 14. ТЕОРЕМА ВИКА ДЛЯ ХРОНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ

Мы можем теперь сформулировать теорему Вика для хронологических произведений. Эта теорема утверждает, что если имеется набор зависящих от времени операторов A_1, A_2, \dots, A_n , для которых определено понятие T -произведения, то справед-

ливо следующее равенство:

$$T(A_1, A_2, \dots, A_n) = \\ = N(A_1, A_2, \dots, A_n) +$$

(Все члены, не содержащие сверток; такой член только один.)

$$+ N(\overline{A_1} A_2 \dots A_n) + N(\overline{A_1} \overline{A_2} A_3 \dots A_n) + \dots +$$

(Все члены, содержащие одну свертку; число таких членов C_n^2 .)

$$+ \dots +$$

(Все члены, содержащие две свертки; число таких членов $\frac{1}{2} C_n^2 C_{n-2}$.)

$$+ \dots +$$

+ Все полностью свернутые члены.

(Такие члены возникают лишь в том случае, если n — четное число.)

(14.1)

Поскольку среднее значение любого N -произведения по основному состоянию невзаимодействующих частиц равно нулю, из (14.1), в частности, следует, что указанное среднее значение для T -произведения равно сумме всех полностью свернутых членов; говорят, что правая часть (14.1) представляет нормальную форму T -произведения $(A_1 A_2 \dots A_n)$.

Уравнение (13.1) является частным случаем (14.1) для двух операторов. Доказательство теоремы (14.1) дано в приложении II; оно непосредственно вытекает из теоремы Вика (10.1) для простых произведений. С помощью (14.1) мы можем рассмотреть теперь второй и более высокие порядки теории возмущений.

§ 15. ВТОРОЙ И БОЛЕЕ ВЫСОКИЕ ПОРЯДКИ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Ограничим свое дальнейшее рассмотрение в двух отношениях. Прежде всего будем рассматривать лишь члены матрицы U , соответствующие переходам вакуум — вакуум. Изучение других, невакуумных членов составляет в известном смысле содержание теории функций Грина; однако, по крайней мере в настоящей главе, как можно видеть из соотношения (5.6) для ΔE , нас будут интересовать лишь средние значения по невозмущенному основному состоянию.

Кроме того, во избежание повторений ограничимся случаем операторов, действующих в импульсном пространстве. При этом имеется в виду, что читатель сможет самостоятельно

проводить рассмотрение для полевых операторов, поскольку, как мы убедились выше, формализм для a - и ϕ -операторов содержит много общего. Таким образом, дальнейшее изложение основано на первом из выражений (7.4) для U_n и развивается в духе Голдстоуна (см., однако, замечание в конце § 11).

Начнем с рассмотрения операторной части соотношения (7.4)

$$P [a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})] \dots \times \\ \times [a_X^\dagger(t_{2n-12n}) a_Y^\dagger(t_{2n-12n}) a_Z(t_{2n-12n}) a_T(t_{2n-12n})]. \quad (15.1)$$

Выше уже указывалось, что мы хотели бы с помощью теоремы Вика (14.1) переписать это выражение в форме нормального произведения. Но, как будет показано ниже, при попытке осуществить такую процедуру мы сразу сталкиваемся с двумя затруднениями. Одно из них состоит в том, что теорема Вика установлена не для P , а для T -произведений. Далее, результаты § 14 были получены в неявном предположении о том, что в произведении не возникает операторов, относящихся к одному моменту времени. Однако выражение (15.1) как раз содержит такие операторы (в группах с четырьмя операторами в каждой), и, например, хронологическое спаривание вида

$$\overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12})}^+$$

пока не определено.

Чтобы определить T -произведение и свертку для любой пары операторов, входящих в (15.1), применим искусственный прием. Он состоит в том, что временные аргументы у операторов, относящихся к одному моменту времени, получают небольшие добавки, которые в конце вычислений устремляются к нулю. Обычно принимают, что в пределах четверки операторов, относящихся к одному моменту времени, каждому оператору, стоящему левее, соответствует более поздний момент времени. Так, например, произведение $a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})$ заменяется произведением $a_K^\dagger(t_{12} + \alpha) a_L^\dagger(t_{12} + \beta) a_M(t_{12} + \gamma) a_N(t_{12})$, причем для бесконечно малых величин α, β, γ выполняется неравенство $\alpha > \beta > \gamma > 0$. Приняв это соглашение, получаем

$$P = T, \quad (15.2)$$

если оператор P действует на произведение таких четверок. Равенство (15.2) выполняется в силу того, что внутри каждой четверки операторы хронологически упорядочены в результате введения бесконечно малых добавок. Таким образом, для проведения полного хронологического упорядочения необходимо переставлять лишь блоки из четырех операторов. Каждая из

таких перестановок, согласно определению P -произведения, приводит к появлению знакового множителя $+1$ [см. (4.9)], согласно же определению T -произведения (12.6), знаковый множитель равен $(-1)^{16} = +1$.

Заменив оператор P в (15.1) на оператор T , мы можем применить к (15.1) теорему Вика. При этом, обращаясь к (14.1), можно несколько упростить формализм, уменьшив число стремящихся к нулю параметров α , β , γ в пределах каждой четверки операторов от трех до одного. Действительно, рассматривая правую часть (14.1), нетрудно заметить, что соглашение о временной последовательности операторов никак не влияет на определение N -произведения — о ней следует думать лишь при проведении хронологических спариваний. Мы знаем, однако, что для двух операторов a^\dagger (или a) хронологическое спаривание равно нулю; отсюда следует, что относительное расположение во времени двух таких операторов для нас безразлично. Мы приходим, таким образом, к правилу, согласно которому определение свертки (13.10) сохраняет силу для относящихся к одному моменту времени операторов a и a^\dagger , если оставить $a(t)$ без изменения, заменив лишь $a^\dagger(t)$ на $a^\dagger(t+0)$. Так, например, имеем

$$\begin{aligned} a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) = \\ = a_K^\dagger(t_{12}+0) a_L^\dagger(t_{12}+0) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}), \end{aligned} \quad (15.3)$$

тогда как [см. соотношение (13.10) и замечания после него]

$$\overline{a_K^\dagger(t)} a_{K'}(t) \equiv \overline{a_K^\dagger(t+0)} a_{K'}(t) = \begin{cases} \delta_{KK'} e^{i\epsilon_{K_0}} & (k < k_f) \\ 0 & (k > k_f) \end{cases}. \quad (15.4)$$

Свертки типа $\overline{a_{K'}^\dagger(t)} a_K^\dagger(t)$ естественным образом не возникают в (7.4), но иногда бывает удобно выразить все свертки через свободные функции Грина G_0 , используя их определение (13.16) и свойство сверток (13.5). Тогда мы получаем

$$-\overline{a_K^\dagger(t)} a_{K'}(t) = \overline{a_{K'}^\dagger(t)} a_K^\dagger(t) = -iG_0(K, -0) \delta_{KK'}. \quad (15.5)$$

Отметим, что из принятого выше соглашения о временном упорядочении в сочетании с (13.3) вытекает равенство

$$\overline{a_K^\dagger(t)} a_{K'}(t) = \underline{a_K^\dagger(t)} a_{K'}(t). \quad (15.6)$$

Таким образом, все простые спаривания в § 11 можно заменить свертками, что обычно и делается в целях единства обозначений; по-настоящему понятие свертки понадобится лишь в членах высшего порядка.

После этих предварительных замечаний мы можем приступить к систематическому изучению матричных элементов выражения (15.1), соответствующих переходу вакуум — вакуум и дающих вклады в $\langle U(t, t_0) \rangle$.

Члены первого порядка уже были рассмотрены в конце § 11; кратко напомним здесь полученные результаты. Согласно (11.1),

$$\langle U_1(t, -\infty) \rangle = \frac{-i}{2} \int_{-\infty}^t dt_{12} \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle \times \\ \times \langle a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) \rangle, \quad (15.7)$$

где

$$\langle a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) \rangle = \\ = \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})} + \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M^\dagger(t_{12}) a_N(t_{12})} \quad (15.8)$$

(мы использовали здесь возможность замены спариваний свертками). Раскрывая левые части в соответствии с (13.8) [см. также (9.9)] и применяя затем (15.5), слагаемые в правой части (15.8) можно записать также в ином виде

$$\overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})} = (-i)^2 \delta_{KN} \delta_{LM} G_0(K, -0) G_0(L, -0), \quad (15.9)$$

$$\overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})} = \\ = -(-i)^2 \delta_{KM} \delta_{LN} G_0(K, -0) G_0(L, -0). \quad (15.10)$$

Диаграммы, соответствующие вкладам (15.9) и (15.10) в (15.7), изображены на фиг. 18,б и 19,б. Сформулируем теперь правило построения таких диаграмм и обратную процедуру — восстановление вкладов в (15.7) по данной диаграмме.

1. Правила для диаграмм первого порядка

1) Построение диаграммы, соответствующей вкладу от полностью спаренных членов, производится следующим образом. Нарисуйте вершину с двумя конечными точками 1 и 2; по-

ставьте в соответствие индексы K и N вершине 1, а индексы L и M — вершине 2, как показано на фиг. 20. Рассмотрите

теперь отдельные свертки $a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} = -a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger}$, дающие вклад в член первого порядка (при этом с необходимостью $\alpha = K$ или L ,

K (ставить на линию, выходящую из 1)

L (ставить на линию, выходящую из 2)

1 ----- 2

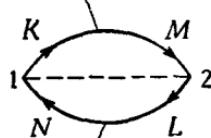
N (ставить на линию, входящую в 1)

M (ставить на линию, входящую в 2)

Фиг. 20.

$\beta = M$ или N). Каждой такой свертке поставьте в соответствие сплошную линию, направленную от конца вершины, соответствующего индексу α , к концу вершины, соответствующему

а) Поставить в соответствие множитель $-i G_0(K, -0) \delta_{KM}$



- а) Поставить в соответствие множитель $-i G_0(K, -0) \delta_{KN}$
- б) Поставить в соответствие множитель $-i G_0(L, -0) \delta_{LM}$

в) Умножить на $(-1)^l$, где l — число петель (в данном случае $l=2$)

- б) Поставить в соответствие множитель $-i G_0(L, -0) \delta_{LN}$
- в) Умножить на $(-1)^l$, где l — число петель (в данном случае $l=1$)

Фиг. 21.

индексу β , и перенесите индексы α и β с концов вершины на эти линии. В результате получатся диаграммы, изображенные на фиг. 18, б и 19, б.

2) *Нахождение вклада данной диаграммы.* Для этого, разумеется, можно просто выписать произведение $a_K^{\dagger} a_L^{\dagger} a_M a_N$ и произвести в нем свертки, указанные на диаграмме. Существует, однако, другой, более удобный метод, преимущества которого выявляются отчетливее при переходе к высшим порядкам. Мы будем использовать именно этот метод, хотя для первого

порядка теории возмущений он выглядит несколько искусственным. Именно, следует записать правые части (15.9) и (15.10), используя предписания, указанные на фиг. 21.

2. Диаграммы второго порядка

Во втором порядке теории возмущений имеем

$$\langle U_2(t, -\infty) \rangle = \frac{(-i)^2}{2^2 2!} \int_{-\infty}^t dt_{34} \int_{-\infty}^t dt_{12} \sum_{\substack{KL \\ PQRS}} \langle KL | v | NM \rangle \langle PQ | v | SR \rangle \times \times \langle T a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) a_R(t_{34}) a_S(t_{34}) \rangle. \quad (15.11)$$

В разложение операторного среднего в (15.11) входит $4! = 24$ члена, которые мы не будем выписывать полностью ввиду их громоздкости. Вместо этого мы подробно рассмотрим три типичных члена, укажем, как изображаются соответствующие им диаграммы, и представим затем явно все 24 диаграммы, по которым читатель при желании может восстановить соответствующие аналитические эквиваленты. Рассмотрим следующие три члена:

$$1) \quad \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})} \overbrace{a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) a_R(t_{34}) a_S(t_{34})} = = - (-i)^4 \delta_{KM} \delta_{NL} \delta_{PS} \delta_{QR} G_0(K, -0) G_0(L, -0) \times \times G_0(P, -0) G_0(Q, -0), \quad (15.12)$$

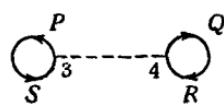
$$2) \quad \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})} \overbrace{a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) a_R(t_{34}) a_S(t_{34})} = = (-i)^4 \delta_{KM} \delta_{LS} \delta_{NP} \delta_{QR} G_0(K, -0) G_0(L, t_{34} - t_{12}) \times \times G_0(N, t_{12} - t_{34}) G_0(Q, -0), \quad (15.13)$$

$$3) \quad \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12})} \overbrace{a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) a_R(t_{34}) a_S(t_{34})} = = (-i)^4 \delta_{KS} \delta_{LR} \delta_{MQ} \delta_{NP} G_0(K, t_{34} - t_{12}) G_0(L, t_{34} - t_{12}) \times \times G_0(M, t_{12} - t_{34}) G_0(N, t_{12} - t_{34}). \quad (15.14)$$

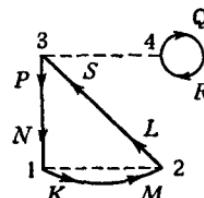
Соответствующие диаграммы изображены на фиг. 22. Для таких диаграмм также существуют правила построения и восстановления по ним соответствующих аналитических выражений.

Теперь можно сформулировать эти правила для диаграмм второго порядка; они состоят в следующем:

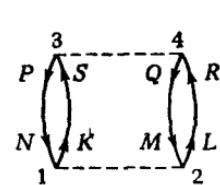
1) Построение диаграммы для полностью свернутого члена. Для этого необходимо изобразить две вершины с концевыми



а



б



в

Фиг. 22. Три типичных примера из числа 24 диаграмм второго порядка.

точками 1, 2 и 3, 4; сопоставить индексы K, N точке 1, индексы L, M — точке 2, P, S — точке 3 и Q, R — точке 4 (фиг. 23).

Далее следует рассмотреть отдельные свертки $\overline{a_a^+} \overline{a_\beta^+} = - \overline{a_\beta^+} \overline{a_a^+}$.

P (на линию из вершины 3)

Q (на линию из вершины 4)

3 —————— 4

S (на линию в вершину 3)

R (на линию в вершину 4)

K (на линию из вершины 1)

L (на линию из вершины 2)

1 —————— 2

N (на линию в вершину 1)

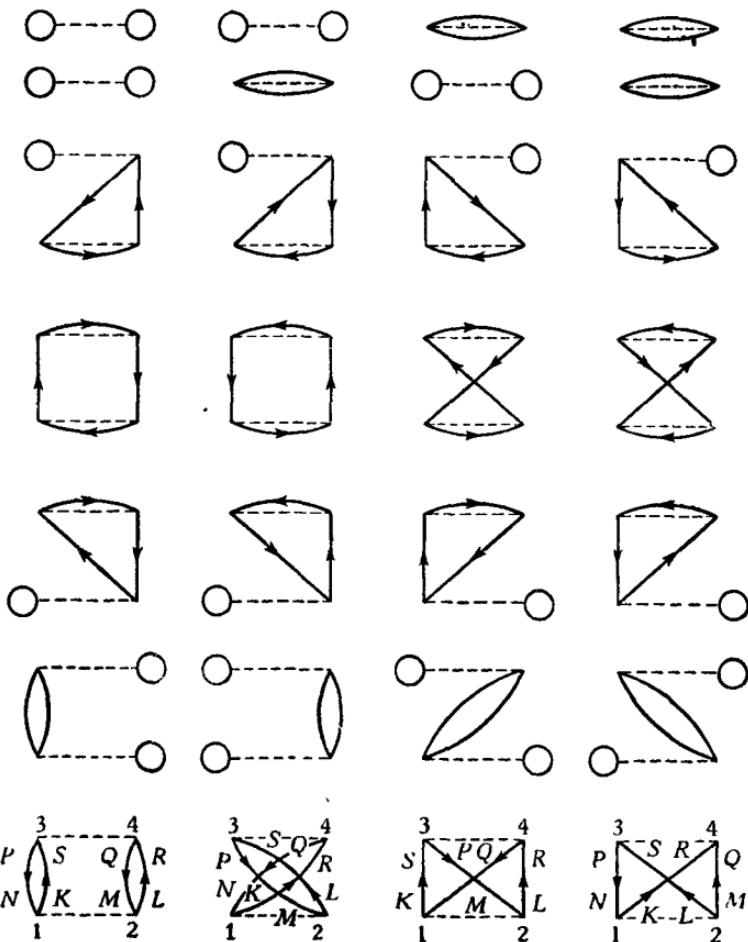
M (на линию в вершину 2)

Фиг. 23.

Для каждой из них нарисовать сплошную линию, направленную от α к β , и перенести индексы на эту линию. Очевидно, что таким способом можно построить диаграммы на фиг. 22, соответствующие выражениям (15.12) — (15.14).

Поскольку временные аргументы t_{12} и t_{34} меняются, мы можем считать, что вершины (1,2) и (3,4) движутся по отношению друг к другу. При $t_{34} > t_{12}$ относительное положение этих вершин соответствует изображенному на фиг. 23, при $t_{12} > t_{34}$ вершины меняются местами. Но при описанном выше способе построения топологическая структура диаграмм всегда

остается неизменной. Отметим, что указанные правила построения совместно с выражениями (13.16) и (13.17) означают,



Фиг. 24. Все диаграммы второго порядка.

что если диаграмма строится с должным соблюдением временного порядка, то линии сверток, направленные в сторону увеличения времени, дают вклад лишь при $k > k_f$, тогда как линии, направленные в сторону его уменьшения, — только при $k < k_f$. Для краткости можно говорить, что частицы движутся во времени вперед, а дырки — назад. Для удобства мы считаем, что диаграмма с порядком времен, указанным на фиг. 23, представляет оба возможных способа временного упорядочения.

2) *Нахождение вклада диаграммы.* Здесь, как и в рассмотренном выше случае диаграмм первого порядка, можно просто

прочитать предыдущее правило в обратном порядке. Однако мы еще раз подчеркнем, что имеется другой способ написания произведения функций G_0 и δ -функций с соответствующим знаковым множителем. Каждой линии свертки, идущей из точки A в момент времени $t_{\lambda\mu}$ к точке B в момент времени $t_{v\sigma}$ (не обязательно отличный от $t_{\lambda\mu}$), необходимо поставить в соответствие множитель $-iG_0(A, t_{v\sigma} - t_{\lambda\mu})\delta_{AB}$, а также знаковый множитель $(-1)^l$, где l — число петель в диаграмме.

Используя сформулированные выше правила, нетрудно записать правые части (15.12) — (15.14) по соответствующим диаграммам на фиг. 22. Заметим, что в диаграмме *a* имеется три петли, тогда как в диаграммах *b* и *v* — по две, и потому в выражение (15.12) входит дополнительный множитель (-1) .

Совокупность всех диаграмм второго порядка изображена на фиг. 24¹⁾ (в большинстве диаграмм индексы вершин не указаны явно). Как уже говорилось в § 11, члены высших порядков систематическим образом строятся из диаграмм первого порядка. Это иллюстрируется здесь на примере диаграмм второго порядка. Очевидно, например, что диаграмма (6,3) на фиг. 24 получается соответствующим соединением концов двух диаграмм типа (2,2) и (3,3), изображенных на фиг. 12. Легко точно проследить процесс такого соединения, если заметить, что один из способов записи вкладов в (15.11) состоит в замене каждой четверки операторов с совпадающими временными аргументами с помощью (11.2). Тогда, вводя для правой части (11.2) очевидное обозначение

$$\sum_{i=1}^7 n_i(K, L, M, N; t_{12}),$$

имеем

$$\begin{aligned} \langle T a_K^+(t_{12}) a_L^+(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) a_P^+(t_{34}) a_Q^+(t_{34}) a_R(t_{34}) a_S(t_{34}) \rangle &= \\ = \left\langle T \sum_{i=1}^7 n_i(K, L, M, N; t_{12}) \sum_{j=1}^7 n_j(P, Q, R, S; t_{34}) \right\rangle &= \\ = \sum_{i, j=1}^7 \langle T n_i(K, L, M, N; t_{12}) n_j(P, Q, R, S; t_{34}) \rangle. & \quad (15.15) \end{aligned}$$

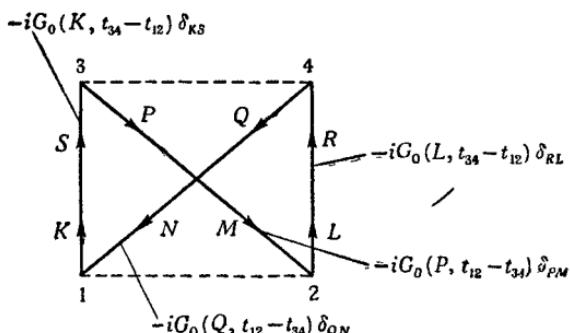
Множители n_i и n_j уже содержат спаривания, а индекс T введен для учета разновременных сверток (последние как раз и связывают между собой диаграммы первого порядка).

Из проведенного выше анализа вытекает, что любая сложная диаграмма, составленная из одной или более диаграмм

¹⁾ Нумерация диаграмм на фиг. 24 соответствует таковой на фиг. 12. — Прим. ред.

первого порядка, дающих нулевой вклад (см., например, фиг. 13, в, г и 16), также дает вклад, равный нулю (в этом можно убедиться непосредственно). Таким образом, мы приходим к выводу, что отличный от нуля вклад в (15.11) дают лишь диаграммы в первой и шестой строках фиг. 24.

Завершая рассмотрение диаграмм второго порядка, укажем способ записи вклада диаграммы (6,3) на фиг. 24 с использованием сформулированного выше правила 2. Множители, входящие в выражение для вклада этой диаграммы, указаны на



Фиг. 25.

фиг. 25; кроме них, выражению следует приписать множитель (-1) ввиду наличия одной замкнутой петли. Таким образом, этой диаграмме соответствует следующий вклад в (15.11):

$$-(-i)^4 \delta_{KS} \delta_{RL} \delta_{PM} \delta_{QN} G_0(K, t_{34} - t_{12}) \times \\ \times G_0(L, t_{34} - t_{12}) G_0(P, t_{12} - t_{34}) G_0(Q, t_{12} - t_{34}). \quad (15.16)$$

3. Диаграммы n -го порядка

При переходе от второго к последующим порядкам никаких новых существенных трудностей не появляется, и потому можно сразу перейти к общему случаю. Главное — сохранять спокойствие по мере усложнения выражений!

Согласно (7.4), имеем

$$\langle U_n(t, -\infty) \rangle = \frac{(-i)^n}{2^n n!} \int_{-\infty}^t dt_{2n-1} dt_{2n} \dots \int_{-\infty}^t dt_{12} \times \\ \times \sum_{\substack{KL \\ KLMN \\ XY \\ XYZT}} \langle KL | v | NM \rangle \dots \langle XY | v | TZ \rangle \times \\ \times \langle T a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) \dots a_Z(t_{2n-1} t_{2n}) a_T(t_{2n-1} t_{2n}) \rangle. \quad (15.17)$$

В (15.17) входит $n!$ составных частей, многие из которых дают нулевой вклад. Сформулируем общие правила построения диаграмм.

1) Построение диаграммы, соответствующей вкладу полностью спаренного члена. Для этого следует изобразить n вершин с концевыми точками $(1, 2), (3, 4) \dots (2n-1, 2n)$ (нечетные номера слева, четные — справа). Сопоставим точке 1 индексы K, N , точке 2 — индексы L, M, \dots , точке $2n-1$ — индексы X, T ,



Фиг. 26.

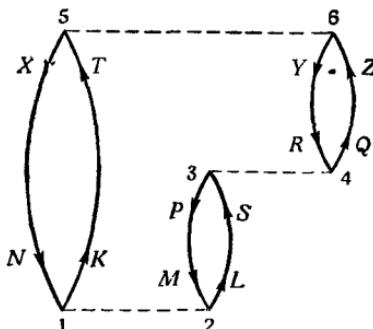
а точке $2n-1$ — индексы Y, Z . Затем для каждой отдельной свертки $\overline{a_\alpha}^+ a_\beta = -\overline{a_\beta}^+ a_\alpha$ изобразим направленную линию, идущую от α к β , и снабдим ее индексами.

Если порядок времен задан, вершины следует располагать в том же порядке; так, на фиг. 26 порядок времен следующий: $t_{12} < t_{34} < \dots < t_{2n-1, 2n}$. Однако топологическая структура диаграмм сохраняется неизменной независимо от порядка вершин (ср. правило 1 для диаграмм второго порядка), так что частицы всегда движутся во времени вперед, а дырки — в обратном направлении. Обычно для удобства мы считаем, что диаграмма с порядком времен, указанным на фиг. 26, представляет семейство $n!$ членов, соответствующих всем возможным порядкам времен.

2) Нахождение вклада диаграммы. Каждой линии спаривания, идущей из точки A в момент $t_{\lambda\mu}$ к точке B в момент $t_{\nu\sigma}$ (не обязательно отличный от $t_{\lambda\mu}$), ставим в соответствие

множитель $-iG_0(A, t_{\nu\sigma} - t_{\lambda\mu})\delta_{AB}$. По построению линии частиц (т. е. сплошные) непременно образуют l замкнутых петель, что требует введения множителя $(-1)^l$.

Очевидно, что эти предписания совпадают с исходными формулами; неясен лишь вопрос о знаке. Доказательство того, что сформулированное правило дает правильный знак, приведено в приложении III.



Фиг. 27.

Рассмотрим в качестве примера диаграмму третьего порядка, изображенную на фиг. 27. Она относится к типу диаграмм, изображенному на фиг. 26 ($n = 3$). Пунктирные линии вершин смешены и укорочены исключительно по соображениям красоты и наглядности. Вклад в $\langle U_3(t, -\infty) \rangle$ имеет вид

$$\frac{(-i)^3}{2^3 3!} \int_{-\infty}^t dt_{56} \int_{-\infty}^t dt_{34} \int_{-\infty}^t dt_{12} \sum_{\substack{KLMN \\ PQRS \\ XYZT}} \langle KL | v | NM \rangle \langle PQ | v | SR \rangle \times \\ \times \langle XY | v | TZ \rangle (-i)^6 \delta_{KT} \delta_{LS} \delta_{MP} \delta_{NX} \delta_{QZ} \delta_{RY} \times \\ \times G_0(K, t_{56} - t_{12}) G_0(L, t_{34} - t_{12}) G_0(M, t_{12} - t_{34}) \times \\ \times G_0(N, t_{12} - t_{56}) G_0(Q, t_{56} - t_{34}) G_0(R, t_{34} - t_{56}). \quad (15.18)$$

Еще раз напомним, что любая диаграмма n -го порядка, которая содержит элемент первого порядка, дающий нулевой вклад, также дает нулевой вклад.

§ 16. ТЕОРЕМА О РАЗЛОЖЕНИИ ПО СВЯЗНЫМ ДИАГРАММАМ

Развитая до сих пор теория основана на соотношении (5.6) [а следовательно, и (5.5)] и не отличается в принципе от метода Рэлея — Шредингера. Таким образом, как подчеркивалось в § 3, этой теории внутренне присущее наличие в каждом по-

рядке разложения для энергии нефизических членов (т. е. членов, не пропорциональных числу частиц N). Однако преимущество развивающегося подхода состоит в том, что его нетрудно представить в форме, содержащей только члены, пропорциональные N .

Чтобы получить ключ к правильной процедуре, поучительно рассмотреть действие развитого выше формализма на тривиальном примере постоянного возмущения. Разумеется, в этом случае нормированная волновая функция системы соответствует обычному решению, описывающему сферу Ферми. Посмотрим, однако, что дает в этом простом случае выражение (5.2). Зная, что V не зависит от времени t , и используя (4.7), можно записать

$$U_a(0, -\infty) = 1 + (-i) \int_{-\infty}^0 dt_1 V e^{at_1} + \\ + (-i)^2 \int_{-\infty}^0 dt_2 \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 V^2 e^{at_1} e^{at_2} + \dots \quad (16.1)$$

Здесь следует отметить необходимость введения адиабатического множителя e^{at} . Произведя простые выкладки в (16.1), находим

$$U_a(0, -\infty) = 1 - \frac{iV}{a} + \frac{(-i)^2}{2!} \frac{V^2}{a^2} \dots = e^{-iV/a}. \quad (16.2)$$

Таким образом, в силу (5.2) получаем

$$\Psi_a(0) = U_a(0, -\infty) \Psi(-\infty) = e^{-iV/a} \Psi(-\infty) = C(a) \Psi(-\infty), \quad (16.3)$$

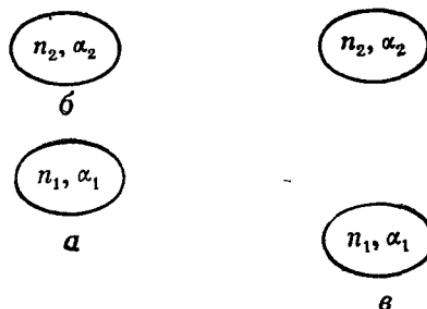
где $C(a)$ в рассмотренном простом случае является c -числом.

Формула (16.3) дает правильное выражение для $\Psi_a(0)$, поскольку с помощью суммирования (16.2) мы всего лишь исправляем первоначальную „ошибку“, состоящую в разложении U -матрицы согласно (16.1). Поскольку мы фактически интересуемся функцией $\Psi(0)$, нормированной на единицу, нам остается лишь опустить множитель $C(a)$ в правой части (16.3) и тем самым избавиться от всех трудностей.

Напомним, что развитие общей теории находится пока на стадии, соответствующей разложению (16.2). (Ниже будет показано [см. (17.3) и (17.4)], что интегрирование по времени, например, в (15.7) дает расходящийся результат.) Таким образом, если это окажется возможным, желательно просуммировать ряд теории возмущений для $\langle U(t, -\infty) \rangle$ и получить таким

образом правильное аналитическое поведение. Оказывается, что такое суммирование не только возможно, но и его результат, как и в простом примере (16.2), можно представить в экспоненциальной форме. Теперь мы видим, почему столь полезно представление сдвига энергии в форме (5.6); нам остается лишь определить показатель искомой экспоненты и продифференцировать его.

Прежде чем доказывать теорему, напомним предварительно определение, приведенное в § 3, п. 3. Если диаграмма распадается на две или более изолированные части, она называется несвязной, а в противном случае — связной. Так, например, диаграммы в первой строке фиг. 24 являются несвязными, тогда как все остальные — связные.



Фиг. 28.

Данное выше определение является геометрическим (топологическим); существует и аналитическое определение, основанное на факторизации математического вклада несвязной диаграммы в $\langle U(t, -\infty) \rangle$. На фиг. 28 приведены три диаграммы, представляющие вклады в $\langle U(t, -\infty) \rangle$. Фиг. 28, *a* изображает диаграмму, состоящую из n_1 вершин, индекс α_1 указывает на ее конкретную геометрическую (топологическую) структуру; аналогично определяется диаграмма на фиг. 28, *b*. Указанное символическое изображение можно применять как для связных, так и несвязных диаграмм. Если мы хотим сосредоточить внимание на двух частях несвязной диаграммы, можно изображать каждую из этих частей отдельно, как это сделано на фиг. 28, *c*. В свою очередь каждая из этих частей может быть как связной, так и несвязной. Таким образом фиг. 28, *c* изображает диаграмму порядка $n_1 + n_2$; разумеется, эта диаграмма несвязная и распадается по крайней мере на две части, имеющие соответственно структуру α_1 и α_2 и число вершин n_1 и n_2 . [В качестве конкретного примера диаграмм типа фиг. 28, *c* можно назвать любое из слагаемых (включая щестое)

из суммы диаграмм (16.10).] Тогда справедливо следующее равенство:

$$\left(\begin{array}{c} (n_2, \alpha_2) \\ \vdots \\ (n_1, \alpha_1) \end{array} \right) = \frac{n_1! n_2!}{(n_1 + n_2)!} ((n_1, \alpha_1)) ((n_2, \alpha_2)). \quad (16.4)$$

Этот результат легко получить, используя выражение (15.17) и следующее за ним правило 2. Обобщая (16.4) по индукции, нетрудно получить следующее соотношение:

$$\left(\begin{array}{c} (n_i, \alpha_i) \\ \vdots \\ (n_1, \alpha_1) \end{array} \right) = \frac{n_1! n_2! \dots n_i!}{(n_1 + n_2 + \dots + n_i)!} ((n_1, \alpha_1)) ((n_2, \alpha_2)) \dots ((n_i, \alpha_i)), \quad (16.5)$$

которое подводит нас к основному результату данного параграфа. Этот результат можно представить и в более общей форме (см. в особенности работы Хаббарда [99, 100]), но почти для всех целей достаточно нижеследующей формулировки.

1. Формулировка теоремы

Пусть $\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}}$ — ряд, который получается из ряда $\langle U(t, -\infty) \rangle$ удержанием в последнем лишь связных диаграмм. Записывая $\langle U(t, -\infty) \rangle$ в явном виде, имеем

$$\begin{aligned} \langle U(t, -\infty) \rangle &= 1 + \{ \text{O---O} + \text{O---O} \} + \\ &+ \left\{ \begin{array}{c} \text{O---O} \\ \text{O---O} \end{array} + \text{O---O} + \text{O---O} + \text{O---O} + \text{O---O} \right\} + \dots \end{aligned} \quad (16.6)$$

тогда

$$\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}} = \{ \text{O---O} + \text{O---O} \} + \{ \text{O---O} + \text{O---O} + \text{O---O} + \text{O---O} \} + \dots. \quad (16.7)$$

Утверждение теоремы состоит в том, что

$$\langle U(t, -\infty) \rangle = \exp \{ \langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}} \}. \quad (16.8)$$

Вставляя этот результат в (5.6), получаем непосредственное следствие теоремы о разложении по связным диаграммам:

$$\Delta E = \left[i \frac{\partial}{\partial t} \langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}} \right]_{t=0}. \quad (16.9)$$

2. Доказательство

Для доказательства теоремы (16.8) просуммируем все диаграммы, входящие в (16.6) и состоящие из m несвязных частей, и покажем, что сумма равна $\{\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}}\}^m/m!$. Для того чтобы лучше воспринять общие рассуждения, полезно проиллюстрировать метод на примере членов низших порядков; при этом обнаружится ряд свойств, используемых при доказательстве общего результата. Случай $m=0$ тривиален, так как левая и правая части равны единице. Случай $m=1$ следует непосредственно из определения (16.7) для разложения по связным диаграммам. Таким образом, первым нетривиальным является случай $m=2$; для него мы дадим доказательство, затем проиллюстрируем случай $m=3$ и лишь затем, опираясь на полученный опыт, перейдем к общему доказательству теоремы.

Вернемся к случаю $m=2$; соответствующие члены в (16.6) имеют вид

$$\begin{aligned}
 & \text{---O} \quad \text{O---O} \quad + \quad \text{---O} \quad + \quad \text{---O} \quad + \quad \text{---O} \quad + \quad \text{---O} \\
 & \text{O---O} \quad + \quad \text{---O} \quad \text{---O} \quad + \quad \text{---O} \quad \text{---O} \quad + \quad \text{---O} \\
 & + \text{O---O} \quad \text{---O} \quad \text{---O} \quad + \quad \text{---O} \quad + \quad \dots \quad (16.10)
 \end{aligned}$$

Мы должны показать, что это разложение совпадает с нижеизложенным:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2!} \{ \langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}} \}^2 = & \frac{1}{2!} \left\{ (\text{---O})^2 + (\text{---O})^2 + 2(\text{---O})(\text{---O}) + \right. \\
 & \left. + 2(\text{---O}) \left(\text{---O} \right) + \dots \right\}. \quad (16.11)
 \end{aligned}$$

Начнем с проверки этого совпадения для изображенных членов. Используя (16.4), первый член (16.10) можно записать в виде

$$\frac{\text{---O}}{\text{---O}} = \frac{1! 1!}{2!} (\text{---O})^2, \quad (16.12)$$

что совпадает с соответствующим членом в (16.11). Аналогично можно поступить и с четвертым слагаемым в (16.10). Рассмотрим теперь третий член в (16.11). Он возникает из второго и

третьего слагаемых (16.10), и их общий вклад равен

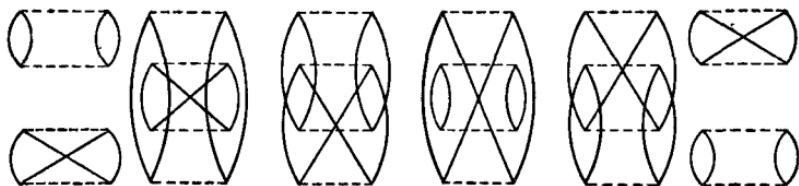
$$2 \left(\begin{array}{c} \textcircled{---\textcircled{o}} \\ \textcircled{\textcircled{o}} \end{array} \right) = 2 \frac{1! 1!}{2!} (\textcircled{---\textcircled{o}}) (\textcircled{\textcircled{o}}), \quad (16.13)$$

что и требуется доказать.

Совершенно аналогично проводятся рассуждения для диаграмм с тремя вершинами; в качестве конкретного примера рассмотрим происхождение четвертого слагаемого в (16.11). Это слагаемое образовано пятым, шестым и седьмым членами в (16.10), которые, согласно (16.4), дают следующий суммарный вклад:

$$3 \left(\begin{array}{c} \textcircled{\textcircled{o}} \\ \textcircled{o} \end{array} \right) = 3 \frac{1! 2!}{3!} (\textcircled{---\textcircled{o}}) \left(\begin{array}{c} \textcircled{\textcircled{o}} \\ \textcircled{o} \end{array} \right). \quad (16.14)$$

Мы вновь, как и в (16.13), получили выражение с требуемым коэффициентом единица.



Ф и г. 29.

Все недиагональные коэффициенты в квадратичной форме (16.11) равны единице. Чтобы лучше уяснить причину этого, рассмотрим еще один пример, а именно член, соответствующий диаграммам фиг. 22, в и фиг. 25. Семейство диаграмм, входящих в (16.10) и дающих вклад в указанный член, изображено на фиг. 29. Количество диаграмм, принадлежащих этому семейству, можно подсчитать следующим образом. Пусть, например, мы начинаем с крайней левой диаграммы на фиг. 29 и последовательно переставляем в ней вершины (не затрагивая при этом линий спаривания), требуя при этом, однако, чтобы внутри каждой субдиаграммы первоначальный порядок следования вершин во времени сохранялся неизменным. Полное число (без ограничений) перестановок вершин равно $4!$; однако для каждой субдиаграммы имеются $2!$ запрещенные внутренние перестановки. Поэтому полное число разрешенных диаграмм,

включая исходную, равно $4!/2!2! = 6$. Используя (16.4), находим, что полный вклад всех диаграмм семейства равен

$$\frac{4!}{2!2!} \left(\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right) = \frac{4!}{2!2!} \frac{2!2!}{4!} \left(\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right), \quad (16.15)$$

причем снова коэффициент, как и требуется, равен единице.

Все коэффициенты при диагональных членах в (16.11) равны $1/2$. Чтобы показать, как возникают такие коэффициенты, поступим следующим образом. Предположим, например, что обменная субдиаграмма на фиг. 29 заменена прямой, так что обе субдиаграммы на фиг. 29 имеют одинаковый вид. Тогда шесть различных полных диаграмм на фиг. 29 вырождаются в три различные пары. Топологическая эквивалентность субдиаграмм приводит к уменьшению суммарного вклада вдвое, так что полный вклад семейства трех диаграмм равен теперь

$$\frac{1}{2} \frac{4!}{2!2!} \left(\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right) = \frac{1}{2} \frac{4!}{2!2!} \frac{2!2!}{4!} \left(\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right)^2, \quad (16.16)$$

причем коэффициент в правой части, как и ожидалось, равен $1/2$.

Теперь, после того как мы проиллюстрировали все важнейшие моменты, легко доказать эквивалентность выражений (16.10) и (16.11). Рассмотрим входящее в (16.11) произведение

общего вида $(\text{---}, \alpha_1)(\text{---}, \alpha_2)$. Вклад в соответствующий

коэффициент дают все члены в (16.10), отвечающие различным диаграммам порядка $n_1 + n_2$, получающимся из изображенной на фиг. 28, с помощью всевозможных перестановок вершин (во многом аналогично тому, как были получены диаграммы на фиг. 29). Сначала, закрепив линии спариваний в концевых точках вершин, мы производим перестановки при условии, что внутри каждой субдиаграммы порядок следования вершин во времени остается неизменным. Число перестановок $n_1 + n_2$ вершин без ограничений равно $(n_1 + n_2)!$ Учитывая, что число запрещенных перестановок для одной субдиаграммы равно $n_1!$, а для другой $n_2!$, мы получаем $(n_1 + n_2)!/n_1!n_2!$ диаграмм.

Если среди субдиаграмм нет топологически эквивалентных, то все полученные в результате перестановок диаграммы раз-

личны, и их полный вклад равен

$$\frac{(n_1 + n_2)!}{n_1! n_2!} \begin{pmatrix} n_2, \alpha_2 \\ n_1, \alpha_1 \end{pmatrix} = \frac{(n_1 + n_2)!}{n_1! n_2!} \frac{n_1! n_2!}{(n_1 + n_2)!} (\textcircled{n}_1, \alpha_1) (\textcircled{n}_2, \alpha_2). \quad (16.17)$$

Здесь использовано равенство (16.4) и получен требуемый коэффициент, равный единице. С другой стороны, если имеются топологически эквивалентные субдиаграммы, то в нашей процедуре построения семейства диаграмм должны быть разрешены и такие перестановки, суммарный эффект которых сводится к тому, что такие субдиаграммы меняются местами, но, разумеется, полная диаграмма остается инвариантной. Поскольку в нашем примере имеются только две субдиаграммы, то в случае их топологической эквивалентности следует разделить полученную выше формулу для полного числа диаграмм семейства на $2!$, а это и дает коэффициент $\frac{1}{2}$ в диагональных членах (16.11). Таким образом, эквивалентность выражений (16.10) и (16.11) доказана.

Приобретя некоторый опыт, мы можем приступить к решению самой общей задачи. Начнем с возведения выражения (16.7) в m -ю степень, применив для этого полиномиальную теорему,

$$\begin{aligned} & \frac{\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}}}{{m!}} = \\ & = \frac{1}{m!} \sum_{x+y+z+\dots=m} \frac{m!}{x!y!z!\dots} (\textcircled{O} \text{---} \textcircled{O})^x (\textcircled{\Leftrightarrow})^y \left(\textcircled{\text{---}} \textcircled{\text{---}} \right)^z \dots \quad (16.18) \end{aligned}$$

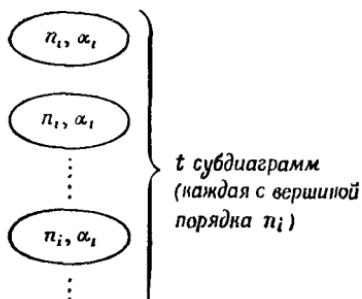
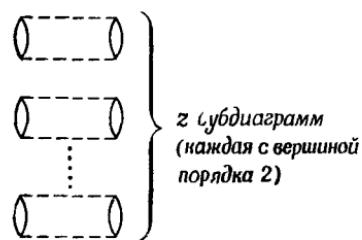
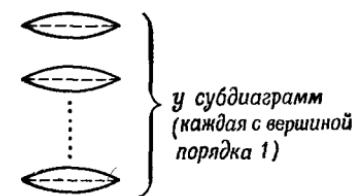
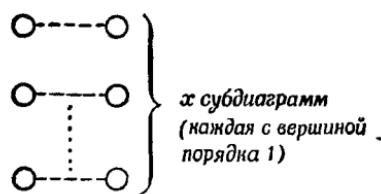
Выясним, какие диаграммы из (16.6) дают вклад в коэффициент при члене $(\textcircled{O} \text{---} \textcircled{O})^x (\textcircled{\Leftrightarrow})^y \left(\textcircled{\text{---}} \textcircled{\text{---}} \right)^z \dots$ в (16.18). Очевидно, соответствующее семейство диаграмм получается путем перестановок вершин у диаграмм, схематически изображенных на фиг. 30. Поскольку полное число вершин (порядок диаграммы) составляет

$$1x + 1y + 2z + \dots + n_i t + \dots,$$

полное число возможных перестановок (без ограничений) равно

$$(1x + 1y + 2z + \dots + n_i t + \dots)!.$$

Однако в полной аналогии с разобранными примерами в низших порядках мы должны учесть: а) запрещенные перестановки вершин внутри каждой субдиаграммы, т. е. разделить полное



Ф и г. 30,

число перестановок на $(1!)^x (1!)^y (2!)^z \dots (n_i!)^t \dots$, и б) перестановки, которые лишь меняют местами одинаковые субдиаграммы, т. е. разделить еще на $x! y! z! \dots t! \dots$. Это позволяет найти полное число диаграмм семейства, дающего вклад в рассматриваемый член. Именно, имеется

$$\frac{(1x + 1y + 2z + \dots + n_it + \dots)!}{(1!)^x (1!)^y (2!)^z \dots (n_i!)^t \dots x! y! z! \dots t! \dots} \quad (16.19)$$

слагаемых, каждое из которых дает вклад в $\langle U(t, -\infty) \rangle$, равный [ср. (16.5)]

$$\frac{(1!)^x (1!)^y (2!)^z \dots (n_i!)^t \dots}{(1.x + 1.y + 2z + \dots + n_i.t + \dots)!} (\text{---O})^x (\text{---O})^y \left(\text{---O} \right)^z \dots \quad (16.20)$$

Полный вклад получаем, умножая (16.20) на (16.19). Таким образом, мы находим, что коэффициент при члене

$$(\text{---O})^x (\text{---O})^y \left(\text{---O} \right)^z \dots$$

совпадает с указанным в (16.18). Поскольку мы рассматривали совершенно произвольный член, тем самым доказано, что сумма всех диаграмм, входящих в $\langle U(t, -\infty) \rangle$ и состоящих из m несвязных субдиаграмм, равна $\{\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}}\}^m / m!$; суммируя затем по всем m , получаем искомый результат (16.8).

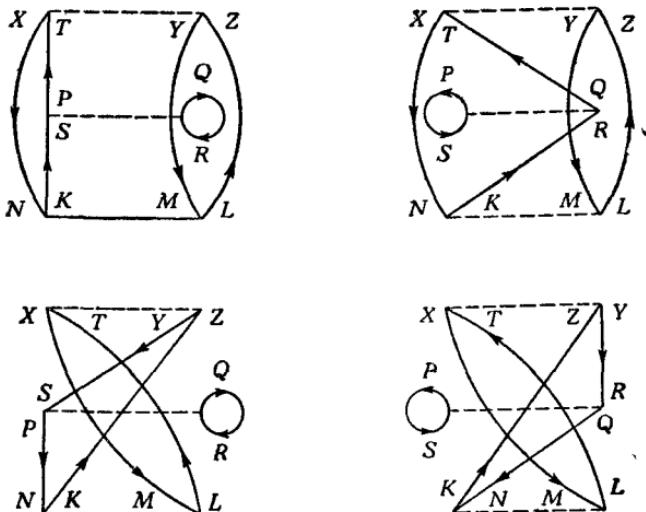
3. Вырождение диаграмм

Получив следствие (16.9) теоремы (16.8), обратимся теперь к изучению связных диаграмм, входящих в разложение (16.7). Мы покажем, что в этом разложении встречаются случаи вырождения, которые следует учесть в окончательных явных выражениях для различных членов.

а) Явные случаи вырождения в (16.7). Рассмотрим в качестве примера диаграммы (6,1) и (6,2) на фиг. 24. Вклад диаграммы (6,1) в (15.11) дается выражением (15.14), а вклад (6,2) нетрудно записать, используя приведенные выше правила. Единственное различие между этими двумя выражениями заключается в том, что некоторые немые индексы меняются ролями, но вклад в (15.11) остается тем же. Точнее, меняются местами точки P и Q , а также R и S . С топологической точки зрения очевидно, что структуры обеих диаграмм одинаковы [можно представлять себе, что вершина (3,4) поворачивается на 180° относительно оси, лежащей в плоскости чертежа]. Аналогичное рассуждение можно провести и для диаграмм (6,3) и (6,4).

Эти примеры характерны и для диаграмм n -го порядка (с n вершинами). Топологически эквивалентные (в указанном выше смысле) диаграммы образуют семейство, состоящее из 2^{n-1} диаграмм, дающих одинаковый вклад в $\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}}$. Пример диаграмм третьего порядка приведен на фиг. 31.

Для доказательства общего утверждения заметим, что один топологически инвариантный поворот вершины описанного выше типа [для конкретности рассмотрим диаграммы (1,1) и (1,2) на



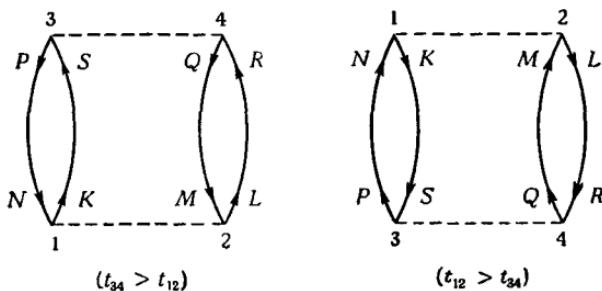
Фиг. 31. Вырожденные диаграммы третьего порядка (явное вырождение).

фиг. 31] соответствует перестановке функций Грина и δ -функций Кронекера в подынтегральном выражении. Эта перестановка эквивалентна обмену между индексами входящей и выходящей линий в интересующей нас вершине ($P \leftrightarrow Q$, $R \leftrightarrow S$ в нашем примере). Указанная перестановка индексов оставляет инвариантными все матричные элементы и сводится лишь к обмену местами немых индексов при сохранении величины вклада в $\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}}$. При фиксированной вершине [например, (1,2)] число возможных перестановок равно $n - 1$, так что число диаграмм в семействе n -го порядка рассмотренного выше типа равно 2^{n-1} .

б) Неявные случаи вырождения в (16.7). Как уже указывалось, любая диаграмма n -го порядка, подобная изображенной на фиг. 26, представляет $n!$ диаграмм со всевозможными способами упорядочения вершин во времени. Так, диаграмма (6,1) на фиг. 24 представляет две возможности, изображенные на фиг. 32. Аналогичный пример для диаграмм третьего порядка

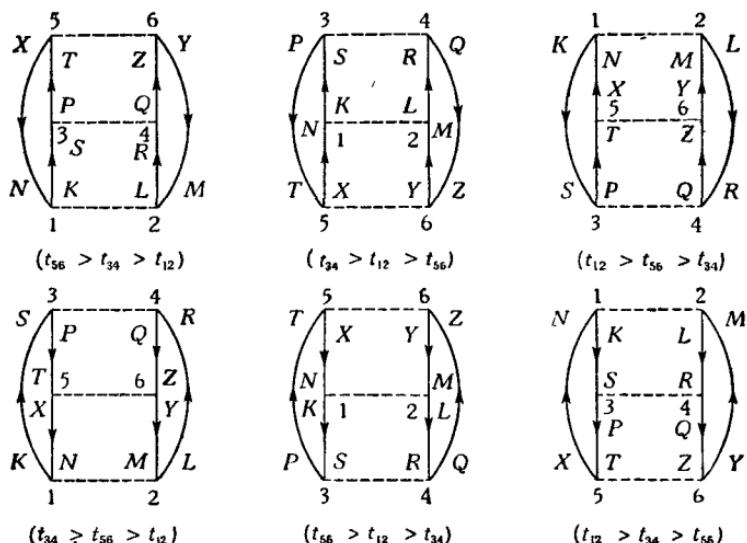
приведен на фиг. 33 (первая из диаграмм обычно является представителем всего семейства).

Выберем теперь любую связную диаграмму n -го порядка с определенными направлениями линий сверток, однако



Фиг. 32. Неявное вырождение в диаграммах второго порядка.

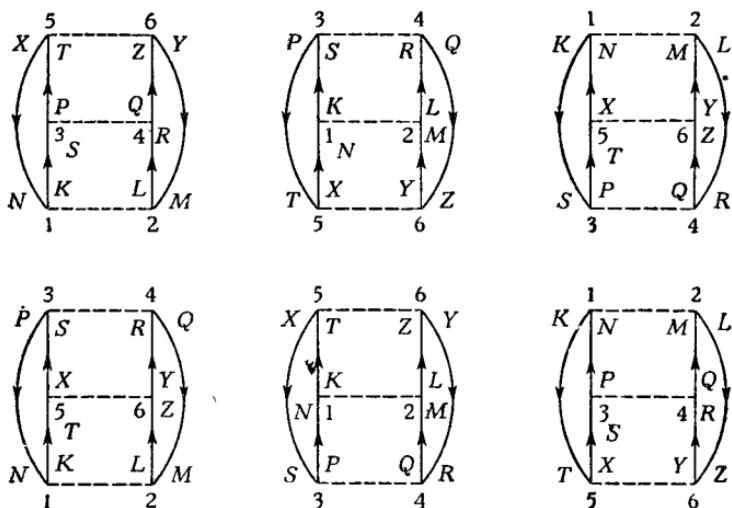
воздержимся пока от расстановки буквенных и цифровых индексов. Другими словами, будем интересоваться здесь одним



Фиг. 33. Диаграммы третьего порядка (неявное вырождение).

из основных понятий, а именно графической структурой, представляющей физический процесс. Расставим теперь обычные индексы $(1, 2), (3, 4), \dots, (2n - 1, 2n)$ со всевозможным порядком времен так, чтобы получить $n!$ диаграмм. Буквенные индексы

можно расставить у концевых точек вершин по обычному правилу (см. правило 1). Иногда при таком способе построения порождается то же семейство диаграмм, что и при указанной выше перестановке вершин; в качестве простого примера можно указать процесс второго порядка, изображенный на фиг. 32. Однако такое совпадение имеет место не всегда. Например, диаграммы на фиг. 34 получены из данной структуры, однако



Фиг. 34.

только половина из них совпадает с диаграммами семейства изображенного на фиг. 33 и полученного с помощью перестановок вершин.

Здесь мы должны сделать следующие важные выводы относительно порождения диаграмм с помощью перестановок вершин и расстановок индексов в структуре.

а) Между совокупностью отдельных диаграмм, полученных каждым из этих методов, существует взаимно однозначное соответствие (несмотря на то что, как мы видели, такое соответствие может отсутствовать для целых семейств).

б) Определив очевидным образом вклад любой из диаграмм, явно упорядоченных во времени (например, согласно правилу 2 с той лишь разницей, что интегрирование по времени производится в заданной последовательности), мы убеждаемся, что все члены одного семейства, порожденного расстановкой индексов у структуры, дают одинаковый вклад. Таким образом, интегрирование по времени в (15.17) можно

записать следующим образом:

$$\frac{1}{n!} \int_{-\infty}^t dt_{2n-12n} \dots \int_{-\infty}^t dt_{34} \int_{-\infty}^t dt_{12} = \int_{-\infty}^t dt_{2n-12n} \dots \int_{-\infty}^{t_{56}} dt_{34} \int_{-\infty}^{t_{34}} dt_{12}. \quad (16.21)$$

Такой результат можно было ожидать заранее ввиду совершенного нами в начале рассмотрения перехода от (4.7) к (4.8). (См. заключительную часть § 11.)

В заключение настоящего параграфа приведем краткое резюме полученных результатов. Наша цель состоит в вычислении сдвига энергии ΔE , определенного формулой (5.6). Поэтому мы начали с анализа матричных элементов по невозмущенному основному состоянию разложения U -матрицы по теории возмущений [см. (7.4) и (16.6)]. После введения понятия связных и несвязных членов удалось [см. (16.8)] переписать исходное среднее от U -матрицы в виде более удобного разложения, содержащего только связные члены. Вся остальная часть главы посвящена дальнейшему изучению этого нового разложения (16.7) и его связи с ΔE [см. (16.9)]. Мы увидим, что с помощью удаления несвязных членов можно полностью исключить из теории нефизические члены, о которых говорилось в § 3.

Выше было показано, что в разложении по связным диаграммам встречаются определенные случаи вырождения, которые будут полезны при наших вычислениях. В особенности важную роль играет использование в § 17 формул (16.21) и (15.17) при переходе к окончательной стадии вычисления — интегрированию по времени.

§ 17. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО ВРЕМЕНИ

Наша цель сейчас заключается в использовании равенства (16.21) для проведения интегрирований по времени в (15.17). Согласно правилу 2, временная зависимость среднего значения в (15.17) заключена в произведении невозмущенных propagatorov, вид которых определяется соотношением (13.17). Собирая различные временные экспоненты, мы неизменно приходим к задаче вычисления интеграла по переменным $t_{2n-12n} > \dots > t_{34} > t_{12}$ от произведения экспоненциальных функций. На этой стадии нам понадобится использовать адиабатическую теорию [см. (5.2) и предшествующие замечания]. Например,

$$\int_{-\infty}^t e^{i\beta t_{12}} dt_{12} = \lim_{\alpha \rightarrow +0} \int_{-\infty}^t e^{(\alpha+i\beta)t_{12}} dt_{12} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{e^{(\alpha+i\beta)t}}{\alpha+i\beta} = \frac{e^{i\beta t}}{i\beta}, \quad (17.1)$$

тогда как при попытке непосредственного вычисления мы получили бы неоднозначный результат. Формула (17.1) легко обобщается; именно, можно записать

$$\int_{-\infty}^t dt_m \dots \int_{-\infty}^{t_3} dt_2 \int_{-\infty}^{t_2} dt_1 e^{i\beta_m t_m} \dots e^{i\beta_2 t_2} e^{i\beta_1 t_1} = \\ = \frac{e^{i(\beta_m + \dots + \beta_2 + \beta_1)t}}{i^m (\beta_m + \dots + \beta_2 + \beta_1) \dots (\beta_3 + \beta_2 + \beta_1) (\beta_2 + \beta_1) \beta_1}. \quad (17.2)$$

После этих подготовительных выкладок перейдем к систематическому рассмотрению проблемы. Как обычно, прежде чем приступить к общей задаче, займемся членами низших порядков.

Первый порядок. Здесь мы сталкиваемся с вычислением среднего значения (15.7), а именно с вычислением прямого и обменного вкладов, определяемых соответственно соотношениями (15.9) и (15.10). Мы имеем

$$\textcircled{---}\textcircled{o} = -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^t dt_{12} \sum_{KLMN} \langle KL|v|NM \rangle (-i)^2 \times \\ \times \delta_{KN} \delta_{LM} G_0(K, -0) G_0(L, -0). \quad (17.3)$$

Подставим теперь явные выражения (13.17) для функций G_0 , обратив внимание на временной аргумент -0 в (17.3); тогда получим

$$\textcircled{---}\textcircled{o} = -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^t dt_{12} \sum_{k, l < k_f} \langle KL|v|KL \rangle (-i)^2 (-i)^2 \quad (17.4)$$

и далее, вводя естественно вытекающее из (16.9) определение, находим

$$(\Delta E)_{1d} \equiv \left[i \frac{\partial}{\partial t} \textcircled{---}\textcircled{o} \right]_{t=0} = \frac{1}{2} \sum_{k, l < k_f} \langle KL|v|KL \rangle. \quad (17.5)$$

Аналогично имеем

$$(\Delta E)_{1e} \equiv \left[i \frac{\partial}{\partial t} \textcircled{---}\textcircled{e} \right]_{t=0} = -\frac{1}{2} \sum_{k, l < k_f} \langle KL|v|LK \rangle. \quad (17.6)$$

Различия между (15.9) и (15.10) отражаются и в формулах (17.5) и (17.6). Уместно напомнить здесь некоторые замечания, сделанные в начале § 16, о необходимости теоремы разложения по связным диаграммам. Если бы мы применили для вычисления ΔE формулу (5.5), нам пришлось бы использовать рас-

ходящееся выражение (17.4). С другой стороны, для ряда в форме (16.9) требуются лишь производные по времени от выражений типа (17.4) и т. д., и оба вычисленных выше вклада — (17.5) и (17.6) — оказываются пропорциональными N .

Второй порядок. Рассмотрим теперь формулу (15.11) и начнем с вычисления члена, представленного диаграммой фиг. 22, в. С помощью (15.14) получаем

$$\begin{aligned} \textcircled{1} &= \frac{(-i)^2}{2^2} \int_{-\infty}^t dt_{34} \int_{-\infty}^{t_{34}} dt_{12} \sum_{\substack{KLMN \\ PQRS}} \langle KL|v|NM\rangle \langle PQ|v|SR\rangle \times \\ &\quad \times \delta_{KS} \delta_{LR} \delta_{MQ} \delta_{NP} G_0(K, t_{34} - t_{12}) G_0(L, t_{34} - t_{12}) \times \\ &\quad \times G_0(M, t_{12} - t_{34}) G_0(N, t_{12} - t_{34}); \end{aligned} \quad (17.7)$$

мы использовали здесь (16.21), чтобы опустить множитель $2!$ и ограничить область интегрирования значениями $t_{34} > t_{12}$. Подставляя G_0 из (13.17) в полученное выше выражение, находим после нескольких элементарных упрощений:

$$\begin{aligned} \textcircled{1} &= \frac{(-i)^2}{2^2} \int_{-\infty}^t dt_{34} \int_{-\infty}^{t_{34}} dt_{12} \sum_{\substack{k, l > k_f \\ m, n < k_f}} \langle KL|v|NM\rangle \langle NM|v|KL\rangle \times \\ &\quad \times e^{-i\epsilon_{KLMN} t_{12}} e^{i\epsilon_{KLMN} t_{34}}, \end{aligned} \quad (17.8)$$

где

$$\epsilon_{KLMN} = \epsilon_K + \epsilon_L - \epsilon_M - \epsilon_N = -\epsilon_{MNKL}. \quad (17.9)$$

Произведем теперь, пользуясь формулой (17.1), интегрирование по t_{12} ; в результате получим

$$\textcircled{1} = \frac{(-i)^2}{2^2} \int_{-\infty}^t dt_{34} \sum_{\substack{k, l > k_f \\ m, n < k_f}} |\langle KL|v|NM\rangle|^2 \frac{1}{i\epsilon_{KLMN}}. \quad (17.10)$$

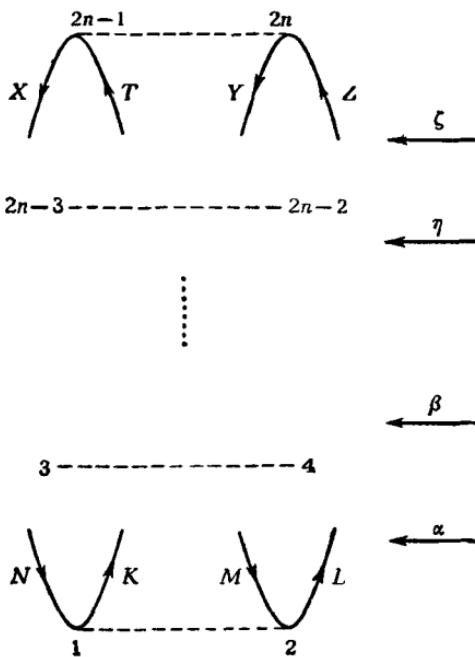
Из-за наличия вырождения первого типа, обсуждавшегося в § 16, диаграмма , топологически эквивалентная диаграмме в (17.10) и описывающая тот же физический процесс, дает в точности такой же вклад в $\langle U(t, -\infty) \rangle_{\text{св}}$. Сумму этих двух равных по величине членов мы будем называть прямыми членами второго порядка и обозначать соответствующий вклад в ΔE через $(\Delta E)_{2d}$. Тогда

$$(\Delta E)_{2d} = \left[i \frac{\partial}{\partial t} \left(\textcircled{1} + \textcircled{2} \right) \right]_{t=0} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, l > k_f \\ m, n < k_f}} \frac{|\langle KL|v|NM\rangle|^2}{\epsilon_{MNKL}}. \quad (17.11)$$

Аналогично, две другие топологически эквивалентные (обменные) диаграммы в (16.7) дают одинаковый вклад. Используя фиг. 25 и формулу (15.16), находим, что их суммарный вклад в (16.9) равен

$$\begin{aligned}
 (\Delta E)_{2e} &= \left[i \frac{\partial}{\partial t} \left(\text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} \right) \right]_{t=0} = \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{k, l > k_f \\ m, n < k_f}} \frac{\langle KL|v|NM\rangle \langle MN|v|KL\rangle}{\epsilon_{MNKL}} \quad (17.12)
 \end{aligned}$$

n-й порядок. Если выбрать любую связную диаграмму *n*-го порядка, то для того, чтобы вклад ее был отличен от



Фиг. 35.

нуля, необходимо потребовать отсутствия на крайних вершинах сверток с одинаковым временем. Таким образом, можно сделать набросок предполагаемой диаграммы, как, например, на фиг. 35 (смысл стрелок, снабженных греческими буквами, будет разъяснен позднее). Внутреннюю структуру диаграммы, заключенную между двумя крайними вершинами, нельзя изобразить, не сделав конкретных предположений. Будем считать,

что в диаграмме имеется h линий дырок (идущих в направлении убывания времени); тогда должно быть $2n - h$ линий частиц, идущих в направлении возрастания времени. Линии сверток с равными временами причисляются к линиям дырок, поскольку их временные аргументы равны -0 .

Используя выражения (15.17), (16.21), правило 2 и применяя сокращенное символическое обозначение для вклада диаграммы на фиг. 35, получаем

$$\begin{aligned}
 \textcircled{n, \alpha} = & \frac{(-i)^n}{2^n} \int_{-\infty}^t dt_{(2n-1)2n} \cdots \int_{-\infty}^{t_{56}} dt_{34} \int_{-\infty}^{t_{34}} dt_{12} \times \\
 & \times \sum_{\substack{KLMN \\ KXYZT}} \langle KL|v|NM\rangle \dots \langle XY|v|TZ\rangle \times \\
 & \times (-1)^l \prod_{\substack{2n-h \text{ линий частиц} \\ (\text{от } t_{\lambda\mu} \text{ к } t_{\nu\sigma})}} \{-iG_0(A, t_{\nu\sigma} - t_{\lambda\mu})\delta_{AB}\} \times \\
 & \times \prod_{\substack{h \text{ линий дырок} \\ (\text{от } t_{X\mu} \text{ к } t_{Y\sigma})}} \{-iG_0(A', t_{Y\sigma} - t_{X\mu})\delta_{A'B'}\}. \tag{17.13}
 \end{aligned}$$

Здесь A, B, A', B' представляют собой просто выборки из совокупности индексов K, L, \dots, X, Y, Z, T ; аналогично времена $t_{\nu\sigma}, t_{\lambda\mu}, t_{Y\sigma}$ и $t_{X\mu}$ выбираются из совокупности $t_{12}, t_{34}, \dots, t_{(2n-1)2n}$.

В силу (13.17) каждую функцию Грина $-iG_0(A, t_{\nu\sigma} - t_{\lambda\mu})$ можно заменить теперь на $\exp\{-i\epsilon_A(t_{\nu\sigma} - t_{\lambda\mu})\}$, если проводить суммирование для частиц (по индексам A, B, \dots) лишь по состояниям вне поверхности Ферми. Аналогично, каждую функцию Грина $-iG_0(A', t_{Y\sigma} - t_{X\mu})$ можно заменить на $-\exp\{-i\epsilon_{A'}(t_{Y\sigma} - t_{X\mu})\}$, если в суммах для дырок (по индексам A', B', \dots) ограничиться состояниями, лежащими внутри поверхности Ферми. Принимая указанные ограничения в суммах по импульсам и учитывая общий знаковый множитель, мы замечаем, что функции Грина для частиц и дырок G_0 дают вклады одинакового типа, так что два произведения в (17.13) можно объединить в следующей записи:

$$\begin{aligned}
 \textcircled{n, \alpha} = & \frac{(-i)^n}{2^n} \int_{-\infty}^t dt_{(2n-1)2n} \cdots \int_{-\infty}^{t_{56}} dt_{34} \int_{-\infty}^{t_{34}} dt_{12} \times \\
 & \times \sum_{(p, h)} \langle KL|v|NM\rangle \dots \langle XY|v|TZ\rangle \prod_{\substack{\text{по всем} \\ \text{линиям}}} \delta_{AB} (-1)^{l+h} \times \\
 & \times \prod_{\substack{\text{по всем линиям} \\ (\text{от } t_{\lambda\mu} \text{ к } t_{\nu\sigma})}} \exp\{-i\epsilon_A(t_{\nu\sigma} - t_{\lambda\mu})\}. \tag{17.14}
 \end{aligned}$$

где индекс (p, h) у знака суммы означает, что суммирование производится по частицам выше сферы Ферми и дыркам ниже сферы Ферми. Далее мы замечаем, что, согласно нашим обозначениям, выходящим линиям сопоставляются индексы K, L, P, Q, \dots, X, Y , а входящим — индексы M, N, R, S, \dots, Z, T . Поэтому можно собрать члены в последнем сомножителе (17.14), переписав его с учетом определения (17.9) в следующем виде:

$$\exp\{i[\epsilon_{XYZT}t_{2n-12n} + \dots + \epsilon_{PQRS}t_{34} + \epsilon_{KLMN}t_{12}]\}. \quad (17.15)$$

Проводя теперь $(n - 1)$ -кратное интегрирование по времени с использованием соотношения (17.2), находим

$$\begin{aligned} \textcircled{n, \alpha} &= \frac{(-i)^{n+l+h}}{2^n} \int_{-\infty}^t dt_{2n-12n} \times \\ &\times \sum_{(p,h)} i^{n-1} (\underbrace{\epsilon_{XYZT} + \dots + \epsilon_{PQRS}}_{\epsilon_{KLMN}} + \epsilon_{KLMN}) \dots (\underbrace{\epsilon_{PQRS} + \epsilon_{KLMN}}_{\epsilon_{KLMN}}) \epsilon_{KLMN}, \end{aligned} \quad (17.16)$$

причем перечеркивание указывает лишь, в каком месте обрывается произведение, входящее в знаменатель, если перечислять множители справа налево. Фактически

$$\epsilon_{XYZT} + \dots + \epsilon_{PQRS} + \epsilon_{KLMN} = 0, \quad (17.17)$$

поскольку, как следует из определения (17.9), каждая энергия ϵ одночастичного состояния (снабженная одним индексом) входит в левую часть (17.17) дважды — один раз с положительным и один раз с отрицательным знаком [разумеется, это верно лишь при учете произведения дельта-символов δ_{AB} , входящего в (17.16)]. Соотношения (17.17) и (17.2) вместе объясняют отсутствие временной зависимости в подынтегральном выражении (17.16).

Нетрудно теперь выписать вклад рассматриваемой диаграммы в ΔE . Снова используя обсуждавшиеся в § 16 свойства вырождения, получаем

$$\begin{aligned} (\Delta E)_{n\alpha} &= \left[i \frac{\partial}{\partial t} (\textcircled{n, \alpha} + \text{Все случаи вырождения типа I}) \right]_{t=0} = \\ &= \frac{(-1)^{l+h}}{2} \sum_{(p,h)} \frac{\langle KL|v|NM\rangle \langle PQ|v|SR\rangle \dots \langle XY|v|TZ\rangle}{\epsilon_{MNKL}(\epsilon_{MNKL} + \epsilon_{RSPQ}) \dots (\underbrace{\epsilon_{MNKL} + \dots + \epsilon_{ZTXY}}_{\epsilon_{ZTXY}})}. \end{aligned} \quad (17.18)$$

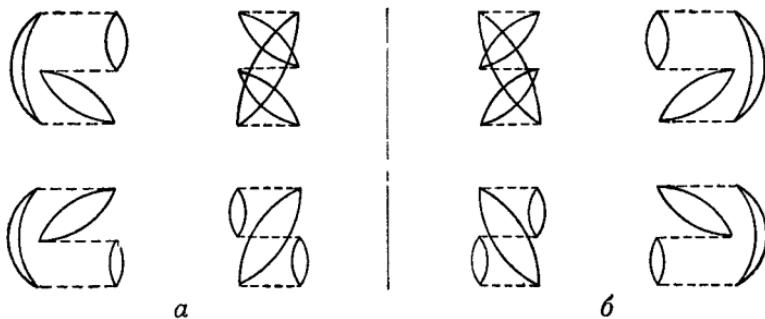
Отметим здесь изменение порядка индексов в энергетических знаменателях и одновременное исчезновение множителя $(-1)^{n-1}$, что по существу является тривиальным следствием свойства симметрии [ср. (17.9)] для каждого из $(n-1)$ множителей в знаменателе (17.18).

Формула (17.18) является основным результатом настоящей главы; она показывает, как следует вычислять вклад произвольной диаграммы в ΔE [сумма всех таких членов символически записана в (3.5)]. При практическом применении быстро можно освоить наименее формальный способ применения соотношения (17.18). Так, член, содержащий произведение б-функций, обычно опускается, а соответствующие индексы (импульса и спина) удваиваются. Кроме того, непосредственно на данной диаграмме можно без особого труда прочитать энергетические множители. Рассмотрим, например, момент времени α (см. фиг. 35), промежуточный по отношению к t_{12} и t_{34} . Разность между суммой энергий дырок и суммой энергий частиц равна ϵ_{MNKL} — первому сомножителю в знаменателе (17.18), — если учитывать только те частицы и дырки, линии которых пересекают ось времени α . Следующий энергетический знаменатель в (17.18) равен $\epsilon_{MNKL} + \epsilon_{RSPQ}$; для его получения, очевидно, нужно сложить энергии всех дырок, линии которых пересекают ось времени β , и вычесть сумму энергий частиц, линии которых удовлетворяют тому же условию. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим представляющиеся возможности. Если свертки отсутствуют, то все линии из точек 3 и 4 располагаются выше вершины (3, 4) и совершенно не зависят от линий K, L, M и N , которые идут на диаграмме вверх. Сумма энергий дырок на оси β равна $\epsilon_M + \epsilon_N + \epsilon_R + \epsilon_S$, тогда как сумма энергий частиц равна $\epsilon_K + \epsilon_L + \epsilon_P + \epsilon_Q$, так что их разность равна как раз $\epsilon_{MNKL} + \epsilon_{RSPQ}$. С другой стороны, возможно наличие сверток, каждая из которых приводит к точному сокращению энергии одной из частиц с энергией одной из дырок, причем соответствующие линии вообще не пересекают ось времени β . Поскольку эти два случая исчерпывают все возможности, исходное предположение доказано. Можно обобщить этот результат для произвольного промежуточного положения оси времени. Именно, соответствующий энергетический знаменатель получается путем вычитания из суммы энергий дырок суммы энергий частиц, линии которых (частиц и дырок) пересекают указанную промежуточную временную ось.

Заметим также, что, применяя формулу (17.18), следует рассматривать прямую свертку при равных временах как одну замкнутую петлю (с учетом правила 2) и одновременно

как одну дырку (поскольку его временной аргумент равен -0); таким образом, знаковый множитель такой свертки $(-1)^2 = 1$.

В качестве примера применения формулы (17.18) рассмотрим семейство диаграмм третьего порядка, состоящее из 2^2 топологически эквивалентных членов, изображенных на фиг. 36, *a*. Полный вклад семейства равен учетверенному вкладу первой



Фиг. 36

диаграммы (эта диаграмма с индексами приведена на фиг. 27). Таким образом, полный вклад в ΔE (обозначим его $(\Delta E)_{3r(a)}$) имеет вид

$$\begin{aligned}
 (\Delta E)_{3r(a)} &= 4 \frac{(-1)^{3+3}}{2} \sum_{\substack{klqstz > k_f \\ mnprxy < k_f}} \langle KL | v | NM \rangle \langle PQ | v | RS \rangle \times \\
 &\quad \times \langle XY | v | TZ \rangle \frac{\delta_{KT}\delta_{LS}\delta_{MP}\delta_{NX}\delta_{QZ}\delta_{RY}}{\epsilon_{MNKL}(\epsilon_{MNKL} + \epsilon_{RSPQ})} = \\
 &= \frac{4(-1)^{3+3}}{2} \sum_{\substack{klq > k_f \\ mnr < k_f}} \frac{\langle KL | v | NM \rangle \langle MQ | v | LR \rangle \langle NR | v | KQ \rangle}{(\epsilon_M + \epsilon_N - \epsilon_K - \epsilon_L)(\epsilon_N + \epsilon_R - \epsilon_K - \epsilon_Q)}. \quad (17.19)
 \end{aligned}$$

Предыдущий анализ дает возможность написать последнюю строчку равенства (17.19) сразу, минуя промежуточное выражение. Семейство диаграмм на фиг. 36, *b* представляет собой зеркальное отражение семейства *a* и дает тот же вклад в ΔE . Оба семейства вместе дают так называемый кольцевой вклад, равный, как следует из вышесказанного, удвоенному выражению (17.19). В гл. 5 мы увидим, что кольцевые диаграммы всех порядков играют важную роль в теории электронного газа высокой плотности,

ЗАДАЧИ

4.1. Изобразить все диаграммы, образующие разложение по теории возмущений, если возмущающий член взаимодействия равен

$$H' = \lambda_q \left(\sum_{\mathbf{k}} \{ A_{\mathbf{k}}^\dagger + A_{\mathbf{k}} \} \right)^2,$$

где операторы $A_{\mathbf{k}}$, $A_{\mathbf{k}}^\dagger$ определены в задаче 3.1.

4.2. Для случая $n = 2$ показать в явном виде, что

$$\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V(t_1) \dots V(t_n) = \\ = \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 P(V(t_1) \dots V(t_n)).$$

Методом индукции доказать результат для общего случая.

4.3. Известно, что если $a_{\mathbf{k}}$, $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ являются операторами уничтожения и рождения, связанными с одночастичным уровнем $|\mathbf{k}\rangle$, то основное состояние системы N частиц имеет вид

$$|G\rangle = \prod_{k=1}^N a_k^\dagger |0\rangle,$$

где $|0\rangle$ — вакуумное состояние, а индекс $k = 1, \dots, N$ нумерует N одночастичных уровней с наименьшими энергиями

Показать, что любое N -частичное состояние, неортогональное к основному состоянию $|G\rangle$, можно представить в любой из следующих форм.

$$|S\rangle = \left\{ \prod_{h=1}^N \left(1 + \sum_{p=N+1}^{\infty} C_{ph} a_p^\dagger a_h \right) a_h^\dagger \right\} |0\rangle,$$

или

$$|S\rangle = \left\{ \exp \left(\sum_{h=1}^N \sum_{p=N+1}^{\infty} C_{ph} a_p^\dagger a_h \right) \right\} |G\rangle$$

Вычислить $\langle G | S \rangle$ и $\langle S | S \rangle$ и объяснить смысл коэффициентов C_{ph} .

4.4. Доказать, что вклад связной диаграммы, содержащей n независимых линий дырок, в энергию основного состояния пропорционален $\rho^{n-1} \Omega$, где ρ — плотность системы, а Ω — занимаемый ею объем.

Глава 5

ФЕРМИ-ЖИДКОСТЬ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе мы рассмотрим существенно однородные системы фермионов. Ясно, что для построения фундаментальной микроскопической теории мы должны сразу же конкретизировать силы взаимодействия. Вместе с тем возможно более общее, хотя и феноменологическое описание, которое не предполагает определения сил в самом начале рассмотрения. Мы имеем в виду теорию ферми-жидкости Ландау.

Наибольший физический интерес представляют такие системы, как однородный электронный газ и жидкий Не³. Первая из указанных систем имеет прямое отношение к проблеме электронной структуры металлов; силы, действующие в такой системе, являются чисто кулоновскими и, как мы увидим ниже, поддаются анализу на основе развитой в гл. 4 теории возмущений для систем многих частиц. Поэтому мы сосредоточим основное внимание на этой проблеме, однако в конце главы обсудим феноменологический подход, который развивается в основном для жидкого Не³.

§ 2. ФИЗИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЭКРАНИРОВАНИЯ В ОДНОРОДНОМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ

Займемся непосредственно микроскопической теорией однородного электронного газа. Такая модель металла была первоначально предложена Зоммерфельдом. Согласно этой модели, металл в первом приближении рассматривается как газ электронов, движущийся в поле однородно распределенного положительного заряда, величина которого выбрана так, чтобы удовлетворялось условие электронейтральности. Указанное „размазывание“ ионов решетки в однородный фон ведет к весьма существенным упрощениям, хотя при этом теряется зонная структура Бриллюэна, столь важная для многих свойств металла. Однако модель Зоммерфельда позволяет просто получить ряд важных черт электрон-электронного взаимодействия, и мы сосредоточим внимание именно на этом аспекте теории металлов.

Ниже мы увидим, что эффективные силы, действующие в электронном газе, обладают значительно меньшим радиусом действия, чем голое кулоновское взаимодействие. Действительно, мы можем непосредственно воспользоваться развитой в гл. 1 теорией возмущений для матрицы плотности и рассмотреть экранирование статического заряда в ферми-газе высокой плотности. Практически, разумеется, экранируется один из электронов, движущийся в металле. Эта задача требует учета зависимости от времени; Эренрайх и Коэн [58] впервые показали, что, оставаясь в рамках временной теории Хартри — Фока, можно рассмотреть эту задачу с большой точностью (см. приложение V).

Затем мы перейдем к применению теории возмущений для многих частиц, развитой в гл. 4, что приведет нас к теории Гелл-Манна и Бракнера [78] (см. также более ранние вычисления Маке [138]), основанной на суммировании выбранных членов в ряду теории возмущений. Следуя этой теории, мы рассмотрим весьма подробно модельный гамильтониан Савады [178], а также описание электронного газа высокой плотности с помощью диэлектрической функции. Мы увидим, что описание с помощью диэлектрической функции, так же как одночастичное описание, приводит к представлению о колективных колебаниях. В действительности ряд основных результатов можно получить элементарными классическими методами. С одним из таких подходов мы встретимся в гл. 8, где в основном мы будем иметь в виду фононы. Однако по существу теория применима и для газа электронов, следует лишь правильно ввести кулоновское взаимодействие. Методы настоящей главы дают в качестве первого приближения классическую плазменную частоту и указывают путь систематического учета поправок.

Чтобы получить предварительное представление о характере эффективного взаимодействия между электронами в ферми-газе, заменим выделенный электрон статическим бесспиновым зарядом. Тогда, применяя развитую в гл. 1 теорию матрицы плотности Дирака, мы можем без труда провести вычисления Хартри для потенциала $V(\mathbf{r})$, создаваемого выделенным электроном на расстоянии \mathbf{r} от него.

В гл. 1 для плотности $\rho(\mathbf{r})$ электронов, окружающих выделенный электрон, было получено выражение, использующее невозмущенную плотность ρ_0 и имеющее следующий вид [ср. (1.7.10)]:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 - \frac{k_f^2}{2\pi^3} \int V(\mathbf{r}') \frac{j_1(2k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2} d\mathbf{r}'. \quad (2.1)$$

Этот результат получен в линейном приближении. Сделаем теперь дополнительное предположение (также обсуждавшееся

в гл. 1, § 9) о том, что $V(\mathbf{r})$ медленно меняется в пространстве (приближение Томаса — Ферми).

Тогда

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 - \frac{q_0^2}{4\pi} V(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

где $q_0^2 = 4k_f/\pi$. Объединяя этот результат с уравнением Пуассона

$$\nabla^2 V = 4\pi(\rho_0 - \rho) - 4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

получаем простой результат

$$V = \frac{1}{r} e^{-qr}. \quad (2.4)$$

Отсюда следует, что присутствие электрона в начале координат едва ли будет ощущаться на расстояниях, превышающих характеристическую длину экранирования q_0^{-1} . Поскольку в хороших металлах $q_0^{-1} \sim 1 \text{ \AA}$, мы видим, что влияние кулоновского взаимодействия практически очень быстро экранируется.

Физическая причина такого поведения очень проста. Выбранная частица электростатически отталкивает другие электроны из своего ближайшего окружения. Суммарный эффект наличия электронного заряда и уменьшения отрицательного заряда вокруг него сводится к резкому ослаблению силы взаимодействия — она приобретает характер экранированной кулоновской силы. К этому результату, по-видимому, следует ввести поправки, которые возникают, во-первых, за счет движения электрона и наличия у него спина и, во-вторых, за счет приближенности самого метода Томаса — Ферми; однако качественная картина при этом не изменится.

1. Фурье-компоненты экранированного взаимодействия

Фурье-образами $V(k)$ голого и экранированного кулоновского потенциалов являются соответственно $4\pi/k^2$ и $4\pi/(k^2 + q_0^2)$. Уточним последний результат, учтя недостатки приближения Томаса — Ферми. Для этого мы должны просто использовать совместно с уравнением Пуассона выражение для плотности (2.1) вместо (2.2). К сожалению, эту задачу в настоящее время нельзя решить в замкнутой форме в \mathbf{r} -пространстве, однако фурье-образ $V(k)$ можно найти. Именно, записывая (2.1) и (2.3) через $V(k)$, получаем

$$\int k^2 V(k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k} + \frac{2k_f^2}{\pi^2} \int V(k) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \frac{j_1(2k_f |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} d\mathbf{r}' d\mathbf{k} = \\ = 4\pi \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}. \quad (2.5)$$

Определенный интеграл по \mathbf{r}' во втором члене левой части (2.5) имеет следующую величину:

$$\begin{aligned} J(k_f, k) &= \frac{2k_f^2}{\pi} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \frac{j_1(2k_f r)}{r^2} d\mathbf{r} = \\ &= \left[\frac{2k_f}{\pi} + \left(\frac{2k_f^2}{\pi k} - \frac{k}{2\pi} \right) \ln \left| \frac{k+2k_f}{k-2k_f} \right| \right]; \end{aligned} \quad (2.6)$$

тогда из (2.5) находим

$$V(k) = \frac{4\pi}{k^2 + J(k_f, k)}. \quad (2.7)$$

Связь с экранированием Томаса — Ферми получается, если аппроксимировать функцию $J(k_f, k)$ ее значением при $k = 0$. Тогда второй член правой части соотношения (2.6) дает $2k_f/\pi$, такое же слагаемое дает первый член, и мы сразу получаем фурье-компоненту $4\pi/(k^2 + q_0^2)$ экранированного кулоновского потенциала. Основное различие между результатом Томаса — Ферми и выражением (2.7) имеет место при $k = 2k_f$; в этой точке, согласно (2.7), первая производная от $V(k)$ терпит разрыв. Но, как известно (см., например, книгу Лайтхилла [130]), такое поведение чрезвычайно существенно сказывается на асимптотической форме фурье-образов. Результаты Лайтхилла почти непосредственно применимы к (2.7); учитывая их, приходим к следующей асимптотической форме взаимодействия:

$$V(r) \sim \frac{\pi}{k_f(1+2\pi k_f)^2} \frac{\cos 2k_f r}{r^3}. \quad (2.8)$$

Этот результат, как нетрудно видеть, существенно отличается от экранированного кулоновского взаимодействия. Наличие таких дальнодействующих осцилляций смешенного заряда вокруг возмущения в электронном газе было впервые замечено Блэндином и др. [19], а к выводу о наличии самосогласованного осциллирующего экранирования, имеющего характер (2.8), пришли независимо ряд авторов [121, 141, 142]. Основной результат (2.7) в \mathbf{k} -пространстве был известен Бардину уже в 1937 г. [10], а также Линдхарду [131].

Мы вновь вернемся к выражению (2.7) в § 5 и 7, а пока кратко повторим полученные выводы. Они состоят в том, что статическое экранирование, которое, согласно (2.4), локализовано вблизи заряда (радиус экранирования q_0^{-1}), должно быть дополнено дальнодействующим осциллирующим взаимодействием (2.8). Последний эффект имеет дифракционную природу, тогда как в вычислениях Томаса — Ферми волновая природа электрона фактически игнорируется (эти вычисления подобны приближению

геометрической оптики). Вообще говоря, для того чтобы получить основные результаты теории электронного газа, необходимо обобщить выражение (2.7) для статической фурье-компоненты $V(k)$ на случай учета временной (или частотной) зависимости.

Установив, что электрон-электронное взаимодействие в электронном газе сильно экранируется, перейдем к вычислению энергии основного состояния, используя развитую в гл. 4 теорию возмущений для многих частиц. Мы увидим, что большой радиус кулоновского взаимодействия препятствует непосредственному применению этих результатов. Однако описанная выше физическая картина в принципе указывает, какие модификации надлежит сделать.

§ 3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ПО ГЕЛЛ-МАННУ И БРАКНЕРУ

Рассмотрим систему N электронов, помещенную в куб со стороной L . Среднее расстояние между частицами r_s определяется обычно соотношением

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3 = \frac{L^3}{N}. \quad (3.1)$$

Выберем гамильтониан так, чтобы энергия выражалась в атомных единицах (удвоенных ридбергах); тогда

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i^N \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \sum_{i < j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3.2)$$

1. Константа связи

Часто бывает удобнее иметь дело не с плотностью частиц, а с интенсивностью взаимодействия между ними. Чтобы понять смысл этой величины, произведем простую линейную замену переменных

$$\xi = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \frac{\mathbf{r}}{r_s}. \quad (3.3)$$

Тогда, используя (3.2), можно записать преобразованный гамильтониан в следующем виде:

$$H' = -\frac{1}{2} \sum_i^N \nabla_{\xi_i}^2 + \lambda \sum_{i < j} \frac{1}{|\xi_i - \xi_j|}, \quad (3.4)$$

где

$$H = \frac{1}{\lambda^2} H', \quad \lambda = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} r_s. \quad (3.5)$$

Исходный куб преобразуется в куб объемом N в ξ -пространстве; средняя плотность частиц в этом пространстве равна, таким образом, единице.

Мы сосредоточим внимание в первую очередь на гамильтониане (3.4), в котором λ (или r_s), очевидно, играет роль константы связи. Нетрудно затем связать результаты, полученные для гамильтониана H' , с результатами для H . Например, в соответствии с (3.5) при преобразовании энергии используется множитель λ^2 . Нетрудно видеть, что высокая плотность (малое значение r_s) исходного электронного газа соответствует слабому взаимодействию в (3.4). Следовательно, мы можем применить к этой задаче теорию возмущений.

2. Формализм вторичного квантования

Чрезвычайно удобным оказывается формализм вторичного квантования, развитый в гл. 3; поэтому перепишем гамильтониан (3.4) в следующем виде:

$$H' = \sum_K \epsilon_K a_K^\dagger a_K + \frac{\lambda}{2} \sum_{K_1 K_2 K_3 K_4} \langle K_1 K_2 | v | K_3 K_4 \rangle a_{K_1}^\dagger a_{K_2}^\dagger a_{K_4} a_{K_3}, \quad (3.6)$$

где a и a^\dagger — обычные фермиевские операторы рождения и уничтожения, $K = (k, \sigma)$, $\epsilon_K = \epsilon_k = 1/2k^2$ и $v(\xi) = 1/\xi$. Матричный элемент определяется следующим образом:

$$\langle K_1 K_2 | v | K_3 K_4 \rangle = \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \Phi_{K_1}^*(x_1) \Phi_{K_2}^*(x_2) \times \\ \times \frac{1}{|\xi_1 - \xi_2|} \Phi_{K_3}(x_1) \Phi_{K_4}(x_2), \quad (3.7)$$

где

$$\Phi_K(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \chi_\sigma(s), \quad d\mathbf{x} = d\xi ds. \quad (3.8)$$

Вычисляя (3.7) на основании соотношения (1.3.6), получаем

$$\langle K_1 K_2 | v | K_3 K_4 \rangle = \frac{1}{N} \delta_{k_1+k_2, k_3+k_4} \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3), \quad (3.9)$$

где

$$v(\mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{r}}{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{4\pi}{k^2}. \quad (3.10)$$

[Строго говоря, интеграл Фурье в (3.10) не существует. Эту трудность можно обойти, предположив, что первоначально взаимодействие частиц описывается экранированным кулоновским потенциалом. Затем, произведя все вычисления, следует в окончательных результатах положить показатель экранирования равным нулю. Это равносильно использованию с самого

начала во всех выражениях фурье-образа $v(k)$, определяемого соотношением (3.10).]

Используя законы сохранения, входящие в матричный элемент (3.9), можно переписать гамильтониан (3.6) в следующем виде:

$$H' = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{\lambda}{2N} \sum_{k_1, k_2, q, \sigma_1, \sigma_2} v(q) a_{k_1+q\sigma_1}^\dagger a_{k_2-q\sigma_2}^\dagger a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1}. \quad (3.11)$$

Потенциальная энергия представляется в виде суммы по операторам, соответствующим рассеянию пары частиц из состояний (k_1, σ_1) , (k_2, σ_2) в состояния (k_1+q, σ_1) , (k_2-q, σ_2) , при котором происходит передача импульса q , с весовым множителем $v(q)$.

Гамильтониан (3.11) будем записывать в виде

$$H' = H_0 + V. \quad (3.12)$$

Если константа связи λ мала, то V , очевидно, является малым возмущением. Невозмущенное уравнение Шредингера имеет вид

$$H_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle, \quad (3.13)$$

где $|\Phi_0\rangle$ — обычный детерминант Слэтера, составленный из плоских волн, среди которых заняты все состояния, соответствующие значениям импульса вплоть до фермиевского $k_f = (3\pi^2)^{1/3}$. Энергия возмущенной системы равна $E_0 + \Delta E$, где ΔE определяется формулой Голдстоуна, доказанной в гл. 4. Точнее, сдвиг энергии получается путем суммирования всех членов типа (4.17.18), что символически можно записать в виде

$$\Delta E = \sum_n \langle \Phi_0 | V \left(\frac{1}{E_0 - H_0} V \right)^n | \Phi_0 \rangle_{\text{св}}; \quad (3.14)$$

здесь индекс „св“ указывает, что следует учитывать только связные диаграммы.

Перейдем теперь к анализу различных членов, входящих в (3.14). Мы увидим, что вклады первого и второго порядков требуют специального рассмотрения, но если мы интересуемся случаем высокой плотности, то члены остальных порядков можно учесть систематическим образом.

3. Вычисления в первом порядке

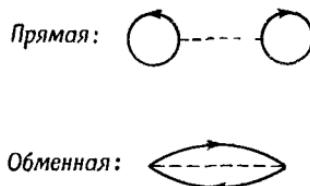
Члены первого порядка можно выписать сразу. Прямой член (фиг. 37) является константой (хотя и бесконечной), но она полностью компенсируется благодаря наличию нейтрали-

зующего положительного фона. Обменный член имеет следующий вид [ср. (4.17.6)]:

$$\frac{2\epsilon_{\text{обм}}^{(1)}}{\lambda^2 N} = - \frac{1}{\lambda N^2} \sum_{\substack{k_1 < k_f \\ k_2 < k_f \\ \sigma_1, \sigma_2}} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{4\pi}{|k_1 - k_2|^2} = - \frac{0,916}{r_s}, \quad (3.15)$$

что нетрудно видеть после некоторых выкладок (см. задачу 2.4).

Выражение (3.15) совпадает с потенциальной энергией, которая получается при использовании детерминанта по плоским



Ф и г. 37.

волнам при вариационном подходе к задаче. Детерминантная волновая функция характеризует независимые частицы, и хотя она учитывает статистическое свойство (электроны с параллельными спинами в какой-то мере избегают друг друга), в ней не находит отражения кулоновское взаимодействие, которое также приводит к отталкиванию электронов (ср. гл. 2). В дальнейшем мы должны будем учесть кулоновские корреляции и, в частности, вычислить энергию корреляции, которую следует добавить к сумме фермиевской и обменной (3.15) энергии, чтобы получить точное выражение для энергии. Энергия корреляции, определенная указанным способом, отрицательна.

4. Члены второго порядка

Вклад в выражение

$$\langle \Phi_0 | V \frac{1}{E_0 - H_0} V | \Phi_0 \rangle$$

дают два процесса, изображенные на фиг. 38. Рассмотрим сначала обменный член; его вклад $\epsilon_{\text{обм}}^{(2)}$ в энергию основного

состояния можно написать, используя (17.12):

$$2\epsilon_{\text{обм}}^{(2)} = \lambda^2 \sum_{\substack{\sigma_1, \sigma_2 \\ k_1, k_2 < k_f \\ |k_1+q|, |k_2-q| > k_f}} \frac{\langle k_2 \sigma_2 k_1 \sigma_1 | v | k_1 + q \sigma_1 k_2 - q \sigma_2 \rangle \langle k_1 + q \sigma_1 k_2 - q \sigma_2 | v | k_1 \sigma_1 k_2 \sigma_2 \rangle}{\epsilon_{k_1+q} + \epsilon_{k_2-q} - \epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2}} =$$

$$= \frac{\lambda^2}{N^2} \sum_{\substack{k_1, k_2 < k_f \\ |k_1+q|, |k_2-q| > k_f}} 2 \cdot \frac{4\pi}{(k_1 - k_2 + q)^2} \frac{\frac{(k_1 + q)^2}{2} + \frac{(k_2 - q)^2}{2} - \frac{k_1^2}{2} - \frac{k_2^2}{2}}{4\pi/q^2};$$

первый множитель 2 под знаком суммы возникает в результате суммирования по спинам. Подставляя $-k_2$ вместо k_2 , получаем

$$\frac{\epsilon_{\text{обм}}^{(2)}}{N} = - \frac{16\pi^2 \lambda^2}{(2\pi)^3} \int \int \int_{\substack{k_1, k_2 < k_f \\ |k_1+q|, |k_2+q| > k_f}} dk_1 dk_2 dq \times$$

$$\times \frac{1}{(k_1 + k_2 + q)^2} \cdot \frac{1}{q^2 + q \cdot (k_1 + k_2)} \cdot \frac{1}{q^2}, \quad (3.16)$$

где произведена обычная замена

$$\frac{1}{N} \sum \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int .$$

Детали вычисления интеграла (3.16) можно найти в книге Бракнера [34]. Для нас важно то, что этот интеграл сходится, и мы получаем в результате

$$\frac{2\epsilon_{\text{обм}}^{(2)}}{\lambda^2 N} = -0,046. \quad (3.17)$$

Рассмотрим теперь прямой член на фиг. 38. Выражение для него имеет вид [ср. (4.17.11)]

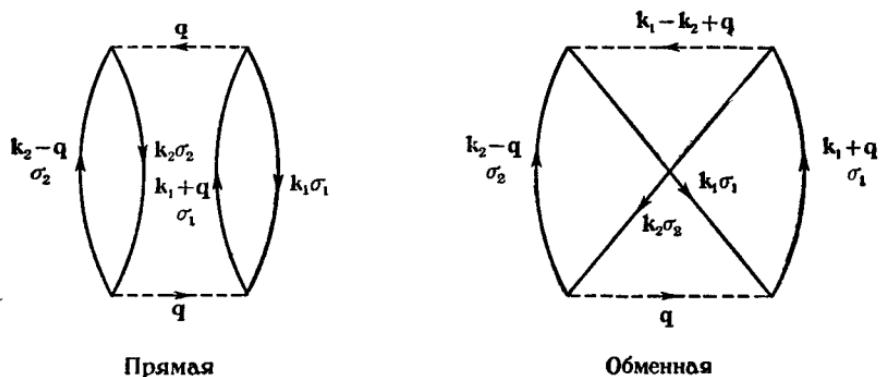
$$2\epsilon_{\text{прям}}^{(2)} = \lambda^2 \sum_{\substack{\sigma_1, \sigma_2 \\ k_1, k_2 < k_f \\ |k_1+q|, |k_2-q| > k_f}} \frac{\langle k_1 \sigma_1 k_2 \sigma_2 | v | k_1 + q \sigma_1 k_2 - q \sigma_2 \rangle \langle k_1 + q \sigma_1 k_2 - q \sigma_2 | v | k_1 \sigma_1 k_2 \sigma_2 \rangle}{\epsilon_{k_1+q} + \epsilon_{k_2-q} - \epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2}} =$$

$$= \frac{\lambda^2}{N^2} \sum_{\substack{k_1, k_2 < k_f \\ |k_1+q|, |k_2-q| > k_f}} 4 \frac{4\pi}{q^2} \frac{\frac{(k_1 + q)^2}{2} + \frac{(k_2 - q)^2}{2} - \frac{k_1^2}{2} - \frac{k_2^2}{2}}{\frac{1}{q^2}} \cdot \frac{4\pi}{q^2}.$$

Поступая во многом аналогично предыдущему, находим

$$\frac{\epsilon_{\text{прям}}^{(2)}}{N^2} = \frac{32\pi^2}{(2\pi)^9} \int_{k_1, k_2 < k_f} \int_{|k_1+q|, |k_2+q| > k_f} dk_1 dk_2 d\mathbf{q} \cdot \frac{1}{q^4} \cdot \frac{1}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)}. \quad (3.18)$$

Покажем теперь, что выражение (3.18) в действительности расходится. Характер и причина этой расходимости, оказывается, играют очень важную роль, и мы рассмотрим этот вопрос подробнее, следуя Бракнеру [34].



Фиг. 38.

Мы видим, что расходимость может возникнуть при малых значениях q в подынтегральном выражении. Рассмотрим отдельно интеграл

$$I(q) = \int_{k_1, k_2 < k_f} \int_{|k_1+q|, |k_2+q| > k_f} \frac{dk_1 dk_2}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)}. \quad (q \text{ мало}). \quad (3.19)$$

Если значение q мало, то в силу ограничений на область интегрирования по импульсам имеем $k_i \sim k_f$. Поэтому можно написать $k_i = k_f - \delta$ ($\delta > 0$), причем величина δ не требует индекса ввиду того, что k_1 и k_2 входят в (3.19) симметрично. Таким образом, после разложения и пренебрежения членами второго порядка, условие $|k_i + q| > k_f$ сводится к тому, что $\delta < q\mu_i$, где $\mu_i = \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{q}$, и мы получаем следующее ограничение на область интегрирования:

$$k_f - q\mu_i < k_i < k_f \quad (q \text{ мало}).$$

Тогда с точностью до главного порядка по q

$$I(q) = \int_0^1 2\pi d\mu_1 \int_{k_f - q\mu_1}^{k_f} k_1^2 dk_1 \int_0^1 2\pi d\mu_2 \int_{k_f - q\mu_2}^{k_f} k_2^2 dk_2 \frac{1}{q^2 + qk_1\mu_1 + qk_2\mu_2}.$$

Интегрирования по k_i ведутся по узкому шаровому слою и потому с точностью до главных порядков можно заменить k_i на k_f в подынтегральном выражении. Опуская в том же приближении член с q^2 в знаменателе, приходим к следующему выражению:

$$I(q) = (2\pi k_f^2)^2 \frac{q}{k_f} \int_0^1 d\mu_1 \int_0^1 d\mu_2 \frac{\mu_1 \mu_2}{\mu_1 + \mu_2} = \frac{8}{3} \pi^2 k_f^3 (1 - \ln 2) q. \quad (3.20)$$

Из (3.19) и (3.20) следует, что интеграл в (3.18) расходится логарифмически. Формально мы могли бы написать

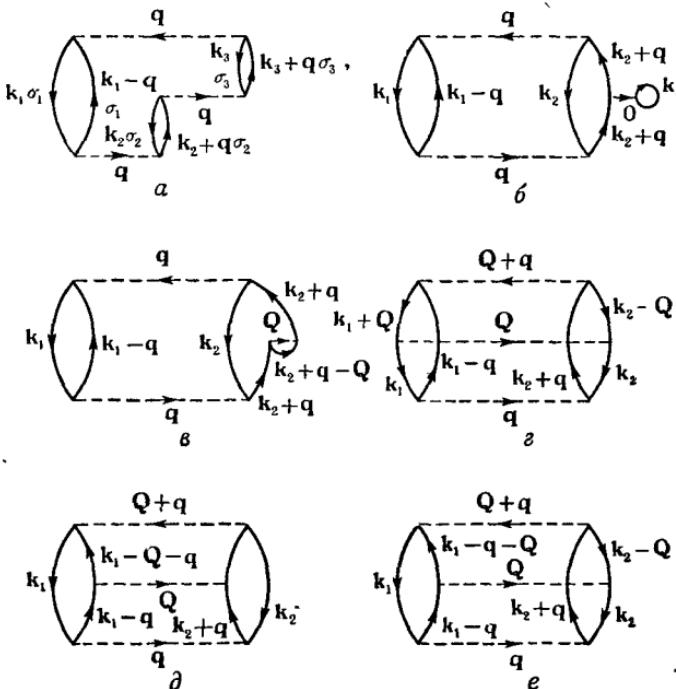
$$\frac{\epsilon_{\text{прям}}^{(2)}}{\lambda^2 N} = \frac{32\pi^2}{(2\pi)^9} \cdot \frac{8}{3} \pi^2 k_f^3 (1 - \ln 2) \int 4\pi q^2 dq \cdot \frac{1}{q^4} \cdot q = \\ = \frac{2}{\pi^2} (1 - \ln 2) \int \frac{dq}{q}, \quad (3.21)$$

где существенно поведение интеграла по q на нижнем пределе.

Проведенный в § 2 анализ эффекта экранирования указывает возможный способ преодоления создавшихся трудностей. Расходимость возникла из-за дальнодействующего характера кулоновского потенциала, фурье-компоненты которого велики при малых q . Мы видели, однако, что в электронном газе кулоновский потенциал почти не ощущается на расстояниях, превышающих характеристическую длину экранирования q_0^{-1} , что находит отражение в экранировании больших фурье-компонент с $q < q_0$. Рассмотренная ситуация остается качественно той же и для модифицированной системы, определенной в § 3, п. 1. Считая эффективный заряд электрона равным не единице, а $\lambda^{1/2}$, не трудно обобщить выражение (2.4). При этом мы получим новую константу экранирования $q'_0 = q_0 \lambda^{1/2}$, где, как и ранее, $q_0^2 = 4k_f/\pi$, но теперь для плотности частиц, равной единице, $k_f = (3\pi^2)^{1/3}$.

Если бы удалось модифицировать исходный потенциал, заменив его потенциалом с соответствующим учетом экранирования, то в (3.21) вошел бы член $\int_{q'_0} dq/q$, уже не содержащий расходимости.

Замечая, что нижний предел интегрирования пропорционален $r_s^{1/2}$, находим, что интеграл имеет вид $\ln r_s + \text{const}$; этот результат сходится, однако он стремится к бесконечности при $r_s \rightarrow 0$. Если основная поправка к результату Хартри — Фока в случае высокой плотности имеет указанный вид, то неудивительно, что наше степенное разложение оказывается непригодным. Это означает, что мы произвели неверное разложение



Фиг. 39.

и, следовательно, для получения разумных результатов нам следует перестроить ряд. Ниже станет ясен метод суммирования всех членов, играющих основную роль в случае высокой плотности. Ключ к такому суммированию мы находим, рассматривая члены третьего порядка.

5. Вклады третьего порядка

Процессы, возможные в третьем порядке теории возмущений, изображены на фиг. 39. Рассмотрим вклад этих процессов в выражение

$$\langle \Phi_0 | V \frac{1}{E_0 - H_0} V \frac{1}{E_0 - H_0} V | \Phi_0 \rangle,$$

Разобьем все диаграммы на два класса: кольцевые диаграммы, у которых величина передаваемого импульса одинакова на всех линиях взаимодействия, и некольцевые диаграммы. Согласно такой классификации, прямая диаграмма второго порядка на фиг. 38, *a* и диаграмма на фиг. 39, *a* относятся к кольцевым, а все остальные диаграммы второго и третьего порядков являются некольцевыми. Мы намерены показать, что, начиная с третьего порядка и выше, кольцевые диаграммы дают вклад порядка единицы в энергию, приходящуюся на одну частицу, тогда как вклад некольцевых диаграмм стремится к нулю одновременно с r_s .

Чтобы пояснить это, рассмотрим кольцевую диаграмму на фиг. 39, *a*. Вклад этой диаграммы в корреляционную энергию равен (здесь следует привлечь формулу (4.17.19) и относящиеся к ней замечания) следующей величине:

$$\frac{\epsilon_{\text{кольцо}}^{(3)}}{\lambda^2 N} = \frac{4\lambda}{N^4} \sum_{\substack{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \\ k_1, k_2, k_3 < k_f \\ |k_1 - q|, |k_2 + q|, |k_3 + q| > k_f}} \langle k_1 \sigma_1 k_3 \sigma_3 | v | k_1 - q \sigma_1 k_3 + q \sigma_2 \rangle \times$$

$$\times \frac{\langle k_2 \sigma_2 k_3 + q \sigma_3 | v | k_2 + q \sigma_2 k_3 \sigma_3 \rangle \langle k_2 + q \sigma_2 k_1 - q \sigma_1 | v | k_2 \sigma_2 k_1 \sigma_1 \rangle}{(\epsilon_{k_3+q} + \epsilon_{k_1-q} - \epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_3})(\epsilon_{k_2+q} + \epsilon_{k_1-q} - \epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2})} \sim$$

$$\sim r_s \int \int \int_{\substack{k_1, k_2, k_3 < k_f \\ |k_1 + q|, |k_2 + q|, |k_3 + q| > k_f}} dk_1 dk_2 dk_3 d\mathbf{q} \times$$

$$\times \frac{1}{q^2} \cdot \frac{1}{q^2 + q \cdot (k_3 + k_1)} \cdot \frac{1}{q^2} \frac{1}{q^2 + q \cdot (k_2 + k_1)} \cdot \frac{1}{q^2} \sim$$

$$\sim r_s \int_{q'_0} \frac{dq}{q^6} q \quad (q'_0 = q_0 \lambda^{1/2}; \text{ см. конец § 3, п. 4}),$$

$$\sim \frac{r_s}{q'^2_0} \sim \text{const}, \text{ так как } q'_0 \sim r_s^{1/2}.$$

Мы видим, что расходимость вызывается накоплением числа множителей $1/q^2$ по одному на каждую линию взаимодействия. Вклад любой некольцевой диаграммы будет меньше (так как в ней соответственно меньше множителей $1/q^2$) и должен поэтому исчезать в пределе $r_s \rightarrow 0$.

Это утверждение оказывается вполне общим, и, таким образом, ведущие члены порядка $A \ln r_s + B$ в корреляционной энергии вычисляются точно, если подсчитать вклады всех кольцевых диаграмм и сложить их с $\epsilon_{\text{общ}}^{(2)}$. В действительности ряд для

кольцевых диаграмм, как показано в приложении IV, можно просуммировать при данном q ; в результате мы получаем выражение, от которого можно взять затем интеграл по всем q . Тогда для корреляционной энергии получаем

$$\frac{2\epsilon_{\text{корр}}}{\lambda^2 N} = 0,0622 \ln r_s - 0,096 + O(r_s). \quad (3.22)$$

Это окончательное выражение дает величину корреляционной энергии (в ридбергах), приходящуюся на одну частицу. В этом, очевидно, и состоит основной результат теории.

• § 4. ГАМИЛЬТОНИАН САВАДЫ

В описанных выше вычислениях Гелл-Манна и Бракнера основное внимание уделялось одночастичному детерминанту $|\Phi_0\rangle$ и поправкам к энергии, которые строились с использованием $|\Phi_0\rangle$.

Однако решение проблемы электронного газа значительно продвинулось вперед после принципиально важного открытия Бома и Пайнса [27], которые установили, что дальнодействующие кулоновские силы не только заметно влияют на одночастичное поведение, но приводят к коллективным колебаниям электронного газа. Вообще говоря, эти коллективные моды не возбуждаются, так как для этого потребовалась бы энергия, значительно превосходящая энергию Ферми; тем не менее, как мы увидим в дальнейшем, они играют важную роль. В простых теориях плазменных колебаний (ср. [168]) сразу появляется фундаментальная величина — плазменная частота ω_p , связанная с плотностью частиц ρ соотношением

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi\rho e^2}{m} \right)^{1/2}. \quad (4.1)$$

[Эта величина будет получена из элементарных соображений в гл. 8, уравнение (8.2.74).] -

Ценность работы Савады (которую мы рассмотрим ниже) состоит, в частности, в том, что в ней ясно указана роль коллективных эффектов, вызываемых кулоновскими силами. В этом заключается отличие от подхода, основанного на теории возмущений в § 3, где отсутствовало четкое разграничение между плазменными колебаниями и одночастичными состояниями.

1. Эффективная потенциальная энергия при высокой плотности

Для того чтобы упростить гамильтониан, заметим прежде всего, что многие члены, входящие в (3.11), дают вклад только в некольцевые диаграммы и, следовательно, могут быть опущены

в приближении высокой плотности. Рассматривая произвольную кольцевую диаграмму, мы видим, что каждая ее вершина характеризуется одним и тем же значением передаваемого импульса \mathbf{q} , причем рождение и уничтожение происходит парами частица — дырка. Рассеяния какого-либо другого типа не происходит. Поэтому, следуя Саваде, мы отбросим все остальные процессы рассеяния, дающие вклад в общее выражение для потенциальной энергии.

Чтобы выделить интересующие нас процессы, перепишем потенциальную энергию, входящую в (3.11), в другой форме

$$V = \frac{\lambda}{2N} \sum_{\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2 = \mathbf{q}} v(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}, \quad (4.2)$$

где суммирование по импульсам ограничено только указанным условием сохранения полного импульса. Опустим теперь большой класс несущественных членов, оставив явно лишь процессы рассеяния типа указанного на кольцевой диаграмме фиг. 39, *a*; как мы увидим, все импульсы передачи в таких процессах равны друг другу. Тогда оператор V принимает следующую более простую форму [необходимо помнить, что должно выполняться условие сохранения импульса, аналогичное указанному в (4.2)]:

$$V_s = \frac{\lambda}{2N} \left\{ \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 < \mathbf{k}_f \\ \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 > \mathbf{k}_f}} + \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2 < \mathbf{k}_f \\ \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 > \mathbf{k}_f}} + \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_2 < \mathbf{k}_f \\ \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1 > \mathbf{k}_f}} + \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 < \mathbf{k}_f \\ \mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_2 > \mathbf{k}_f}} \right\} \times \\ \times v(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} = \quad (4.3)$$

$$= \frac{\lambda}{2N} \sum'_{\text{Паули}} v(\mathbf{q}) \left\{ a_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q} \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q} \sigma_1} + \right.$$

$$+ a_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q} \sigma_1} +$$

$$+ a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q} \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} + a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \right\}. \quad (4.4)$$

Здесь штрих у знака суммы означает, что индексы типа $\mathbf{k}_i \pm \mathbf{q}_i$ относятся к импульсам частиц, тогда как отдельные индексы \mathbf{k}_i обозначают импульсы дырок. Индекс „Паули“ означает, что должен удовлетворяться принцип Паули. Так, например, в первом члене (4.4) $\mathbf{k}'_1 \neq \mathbf{k}'_2$, если $\sigma_1 = \sigma_2$. Правило написания членов выражения (4.4) состоит в том, что для

дырок следует сохранять те же значения импульсных индексов, что и в (4.3), тогда как индексы частиц следует переопределить в соответствии с законами сохранения, указанными в (4.2). Соотношение (4.4) нетрудно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} V_s &= \frac{\lambda}{2N} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \sigma \sigma'}} \{ a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger a_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} + a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} + \\ &\quad + a_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger a_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} a_{-\mathbf{k}\sigma} + a_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{-\mathbf{k}\sigma} \} = \\ &= \frac{\lambda}{2N} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \sigma \sigma'}} \{ d_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma) + d_{-\mathbf{q}}^\dagger(-\mathbf{k}\sigma) \} \{ d_{-\mathbf{q}}(-\mathbf{k}'\sigma') + d_{\mathbf{q}}^\dagger(\mathbf{k}'\sigma') \}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

Паули

где

$$d_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma) = a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}. \quad (4.6)$$

Очевидно, оператор d , определяемый соотношением (4.6), можно считать оператором уничтожения пары электрон — дырка, тогда



Фиг. 40. Вершины кольцевых диаграмм.

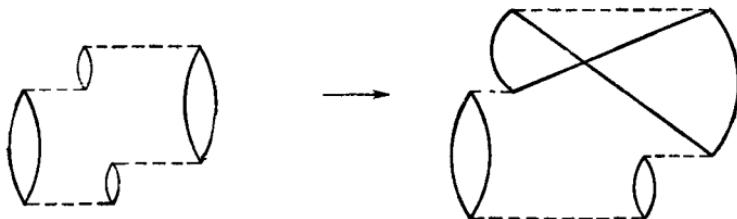
как эрмитово сопряженный оператор d^\dagger соответствует рождению такой пары. Мы увидим, что эти операторы служат мощным инструментом при изучении элементарных возбуждений в электронном газе.

Следует отметить еще один пункт, касающийся выбранной формы для V_s . Мы убедились, что все вершины принадлежат к типу вершин, входящих в кольцевые диаграммы, т. е. имеют вид, изображенный на фиг. 40. Однако из вершин такого вида состоят не только кольцевые диаграммы. Чтобы построить соответствующий пример, достаточно поменять местами две линии частиц на кольцевой диаграмме, как показано, например, на фиг. 41. Структура вершин при этом не меняется. Однако поскольку все подобные диаграммы (кроме обменной диаграммы второго порядка) дают в пределе высокой плотности исчезающее малый вклад в энергию, для нас несущественно, включены они или нет. Остается выяснить, дает ли вклад обменная диаграмма второго порядка (фиг. 42). Она, оказывается, также не дает вклада, поскольку наличие двух линий дырок означает, что

$\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2$ (в соответствии с принципом Паули), а из этого в свою очередь следует, что

$$\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{q} \neq \mathbf{0},$$

т. е. передаваемые импульсы различны, тогда как в (4.4) должно строго выполняться условие их равенства.

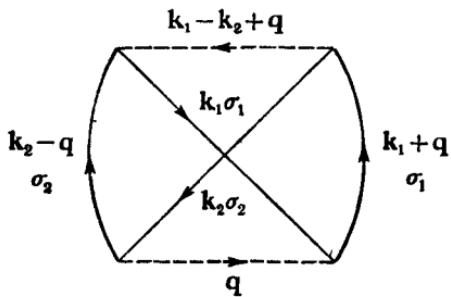


Ф и г. 41.

Отсюда можно сделать вывод, что гамильтониан

$$H_s = T + V_s, \quad (4.7)$$

который дает основную логарифмическую поправку к корреляционной энергии, описывает электронный газ высокой плотности. Чтобы получить правильное значение корреляционной энергии



Ф и г. 42. Обменная диаграмма второго порядка.

с точностью до постоянного слагаемого в разложении, следует сложить выражение (3.17) для $\epsilon_{\text{обм}}^{(2)}$ с точной энергией основного состояния H_s .

Очевидно, что наша очередная задача состоит в изучении гамильтониана H_s ; оказывается, что здесь возможен аналитический подход.

2. Элементарные возбуждения

Остановимся здесь на основных пунктах рассуждения (детали приведены в приложении VI). Пусть основное состояние системы определяется уравнением

$$H\Psi = E\Psi. \quad (4.8)$$

Построим теперь возбужденные состояния. Рассмотрим для этого оператор нормального колебания Ω_K , такой, что

$$[H, \Omega_K^\dagger] \Psi = \omega_K \Omega_K^\dagger \Psi. \quad (4.9)$$

Из (4.8) и (4.9) непосредственно вытекает

$$H\Omega_K^\dagger \Psi = (E + \omega_K) \Omega_K^\dagger \Psi. \quad (4.10)$$

Следовательно, $\Omega_K^\dagger \Psi$ является возбужденным состоянием системы с энергией возбуждения ω_K . Далее, взяв выражение, сопряженное с (4.9), и используя (4.8), получаем

$$H\Omega_K \Psi = (E - \omega_K) \Omega_K \Psi. \quad (4.11)$$

Поскольку основное состояние определяется уравнением (4.8), а не (4.11), с необходимостью имеем

$$\Omega_K \Psi = 0. \quad (4.12)$$

Если считать, что для волновой функции Ψ основного состояния можно найти подходящую форму, то (4.10) позволит, по крайней мере в принципе, построить возбужденные состояния и соответствующие им энергии возбуждения ω_K .

Как работает метод, можно прежде всего проверить на примере системы независимых фермионов, для которой ответ известен заранее. Простейшие возбуждения, сохраняющие число частиц, — это пары частица—дырка, описываемые оператором (4.6). В этом нетрудно убедиться, заметив, что

$$\begin{aligned} [T, d_q^\dagger(k\sigma)] &= (\epsilon_{k+q\sigma} - \epsilon_{k\sigma}) d_q^\dagger(k\sigma) \equiv \\ &\equiv \omega_q(k\sigma) d_q^\dagger(k\sigma) \quad (k < k_f, |k+q| > k_f), \end{aligned} \quad (4.13)$$

а $(\epsilon_{k+q\sigma} - \epsilon_{k\sigma})$ представляет собой, как мы знаем, энергию возбуждения, связанную с состоянием, которое получается действием оператора $d_q^\dagger(k\sigma)$ на невозмущенное распределение Ферми.

Применим теперь тот же метод к гамильтониану Савады (4.7). Прежде всего нужно решить, какой оператор выбрать в качестве Ω_K . У нас есть данные для такого выбора, поскольку эксперимент показывает, что низколежащие одночастичные возбуждения часто очень напоминают соответствующие возбуждения

системы независимых фермионов. Поэтому естественно попробовать, подойдут ли для наших целей операторы $d_q(k\sigma)$. Выражение для коммутатора $[T, d_q^\dagger(k\sigma)]$ уже получено [см. (4.13)]; остается вычислить $[V_s, d_q^\dagger(k\sigma)]$. Детали таких вычислений читатель может найти в приложении V, где показано, что

$$[V_s, d_q^\dagger(k\sigma)] = \frac{\lambda}{N} v(q) \sum_{k'\sigma'} \{d_q(k'\sigma') + d_{-q}^\dagger(-k'\sigma')\}. \quad (4.14)$$

Хотя мы и не получили еще уравнений вида (4.9), достаточно заметить, что сами операторы d и d^\dagger непосредственно не подходят для использования в качестве Ω_K , однако можно взять определенную линейную комбинацию этих операторов. Именно, запишем

$$\eta_q(\omega) = \sum_{\substack{\sigma, k < k_f \\ |k+q| > k_f}} \{C_q(k\sigma, \omega) d_q(k\sigma) + D_q(k\sigma, \omega) d_{-q}^\dagger(-k\sigma)\} \quad (4.15)$$

и потребуем, чтобы выполнялось соотношение

$$[H_s, \eta_q^\dagger(\omega)] = \omega \eta_q^\dagger(\omega). \quad (4.16)$$

После приведения подобных членов имеем

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\sigma, k < k_f \\ |k+q| > k_f}} \{\omega - \omega_q(k\sigma)\} C_q^*(k\sigma, \omega) d_q^\dagger(k\sigma) + \\ & + \{\omega + \omega_q(k\sigma)\} D_q^*(k\sigma, \omega) d_{-q}^\dagger(-k\sigma) - \frac{\lambda}{N} v(q) \{C_q^*(k\sigma, \omega) - \\ & - D_q^*(k\sigma, \omega)\} \sum_{\sigma', k' < k_f} \{d_q(k'\sigma') + d_{-q}^\dagger(-k'\sigma')\} = 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Уравнение (4.17) является уравнением на собственные значения для энергий возбуждения ω . Нетрудно убедиться в том, что выбор коэффициентов в (4.15) в виде

$$C_q^*(k\sigma, \omega) = \frac{\text{const}}{\omega - \omega_q(k\sigma)}, \quad D_q^*(k\sigma, \omega) = \frac{\text{const}}{\omega + \omega_q(k\sigma)} \quad (4.18)$$

обеспечивает выполнение равенства (4.17), если выполняется условие

$$\epsilon_q(\omega) \equiv 1 - \frac{\lambda}{N} v(q) \sum_{\substack{\sigma, k < k_f \\ |k+q| > k_f}} \left(\frac{1}{\omega - \omega_q(k\sigma)} - \frac{1}{\omega + \omega_q(k\sigma)} \right) = 0. \quad (4.19)$$

Уравнение (4.19) представляет собой дисперсионное уравнение Бома – Пайнса, которое мы детально обсудим ниже.

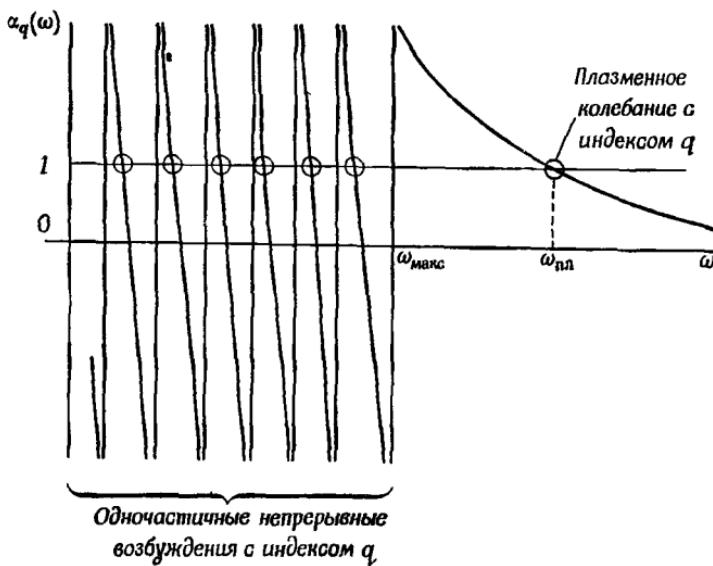
3. Плазменные колебания

Используя наше определение (4.13) для $\omega_q(k\sigma)$, не содержащее зависимости от спина, можно записать (4.19) в другой форме:

$$\alpha_q(\omega) \equiv \frac{2\lambda}{N} v(q) \sum_{\substack{k < k_f \\ |k+q| > k_f}} \left(\frac{1}{\omega - [1/2g^2 + q \cdot k]} - \frac{1}{\omega + [1/2g^2 + q \cdot k]} \right) = 1. \quad (4.20)$$

Это соотношение, очевидно, является определением α_q .

Решения уравнения (4.20) можно исследовать графически. На фиг. 43 представлена зависимость $\alpha_q(\omega)$ от частоты ω :



Фиг. 43 Плазменное колебание

точки, обведенные кружками, соответствуют пересечениям кривой $\alpha_q(\omega)$ с прямой $\alpha_q = 1$. Основное свойство этих решений состоит в том, что все они (за исключением одного) лишь немножко смещены от значений $\omega_q(k\sigma)$, соответствующих независимым частицам. Аналогично энергиям $\omega_q(k\sigma)$ эти решения заполняют квазиконтинуум от нуля до энергии ω_{\max} , определяемой импульсом Ферми. Особая точка располагается далеко справа, и значение $\omega_{pl} = \omega_p$ определяется той ветвью $\alpha_q(\omega)$, которая отделяется от континуума и принимает значение, равное единице, значительно выше ω_{\max} .

Возбужденные состояния квазинепрерывного типа называются одночастичными возбуждениями, поскольку, как явствует из (4.17), вблизи точек $\omega = \omega_q(k\sigma)$ оператор $d_q(\omega)$ входит в определяемую соотношением (4.15) линейную комбинацию $\eta_q(\omega)$ с весом, значительно превышающим вес оператора $d_{-q}^{\dagger}(-k\sigma)$. Фактически в этом случае $\eta_q(\omega) \sim d_q(\omega)$, и, как уже отмечалось, выражение для энергии имеет такой же вид, как и в системе независимых частиц. В то же время удаленное от континуума особое решение не обладает указанными свойствами, и все частицы вносят тот или иной вклад в коэффициенты линейной формы (4.15). Поэтому такое состояние в принципе характеризует только коллективное поведение; это и есть плазменные колебания, упоминавшиеся ранее. [Зависимость от времени можно получить сразу, связывая коммутатор (4.16) с производной $\eta_q(\omega)$ по времени.] Плазменные колебания соответствуют когерентному движению электронов при изменении всех волновых векторов на одинаковую величину \mathbf{q} . Плазменные колебания в пределе длинных волн (т. е. в пределе малых q) можно исследовать следующим образом. Поскольку $\omega_p > \omega_q(k\sigma)$, можно разложить (4.20) по степеням $\omega_q(k)/\omega_p$:

$$\frac{2\lambda}{N} v(\mathbf{q}) \sum_{\substack{k < k_f \\ |\mathbf{k} + \mathbf{q}| > k_f}} \left\{ 2 \frac{\omega_q(k)}{\omega_p^2} + 2 \frac{\omega_q^3(k)}{\omega_p^4} + \dots \right\} = 1. \quad (4.21)$$

Записывая затем в явном виде $\omega_q(k) = \sqrt{q^2 + \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}$ и $v(\mathbf{q}) = 4\pi/q^2$ и замечая, что $\sum \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}$ обращается в нуль, поскольку выражение под знаком суммы нечетно по \mathbf{k} , находим

$$\frac{2\lambda}{N} \cdot \frac{4\pi}{q^2} \sum_{\substack{k < k_f \\ |\mathbf{k} + \mathbf{q}| > k_f}} \left\{ \frac{q^2}{\omega_p^2} + \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})^3}{\omega_p^4} + \dots \right\} = 1, \quad (4.22)$$

или

$$\left\{ \frac{2\lambda}{N} \cdot 4\pi \sum_{k < k_f} \frac{1}{\omega_p^2} \right\} + \text{Члены высших порядков по } q = 1. \quad (4.23)$$

Таким образом, для очень длинных волн имеем

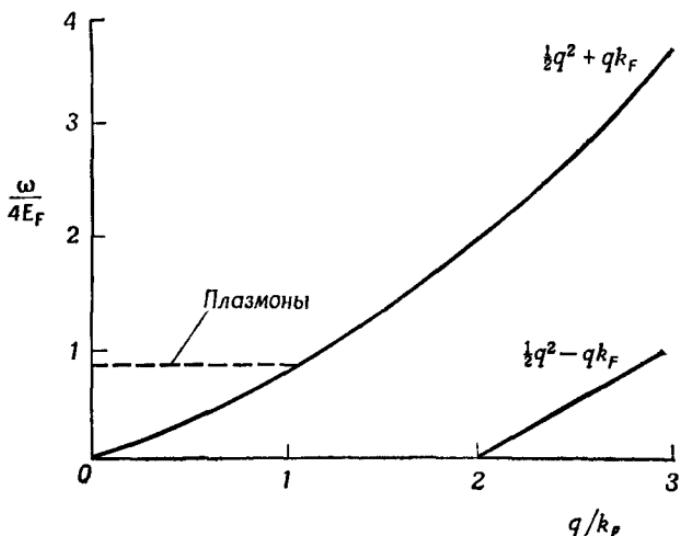
$$\frac{2\lambda}{N} \cdot 4\pi \cdot \frac{1}{\omega_p^2} \cdot \frac{N}{2} = 1, \quad (4.24)$$

или

$$\omega_p = (4\pi\lambda)^{1/2}. \quad (4.25)$$

Последнее выражение соответствует классической плазменной частоте электронного газа единичной плотности с зарядом электрона $\lambda^{1/2}$. Для перехода к исходной задаче вспомним правило, приведенное после соотношения (3.5), и разделим (4.25) на λ^2 . При этом снова получается знакомый результат (4.1) с которого мы начали обсуждение коллективных возбуждений.

Фактически выражение (4.20) можно проинтегрировать точно (см. [100, 179]). При этом оказывается, что при возрастании q



Ф и г. 44. Спектр возбуждений.

Непрерывный спектр возбуждений частиц—дырок лежит между кривыми $(\frac{1}{2}q^2 + qk_F)$ и $(\frac{1}{2}q^2 - qk_F)$.

частота $\omega_p(q)$ мало меняется по сравнению со своим классическим значением, пока наконец она не сольется с непрерывным спектром при $q = k_F$. При этом плазменные колебания становятся неустойчивыми. Дальнейшие детали читатель может найти в работах [163, 156], а также в работах, цитированных выше.

Теперь можно понять характер спектра возбуждений, представленного на фиг. 44. Следует еще раз подчеркнуть, что при $q \ll k_F$ величина ω_p в несколько раз превосходит энергию Ферми, поэтому плазменные колебания довольно трудно возбудить (до этого система ведет себя подобно системе независимых фермионов). Разумеется, описанная выше теория является приближением слабой связи, но практически оказалось, что она описывает много свойств, экспериментально наблюдаемых в металлах.

§ 5. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ФЕРМИ-ГАЗА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ

Обратимся теперь к другому способу изучения свойств электронного газа, а именно найдем отклик, или реакцию, этой системы на слабое внешнее возмущение. Гамильтониан электронного газа удобно преобразовать к следующему виду:

$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \mathcal{H}_{\text{кул}} \equiv \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_k \rho_{-k} - N), \quad (5.1)$$

где величина

$$\rho_k = \sum_i e^{-ik \cdot r_i} \quad (5.2)$$

представляет собой фурье-компоненту плотности электронов $\rho(\mathbf{r})$, или так называемую флуктуацию плотности. Будем считать, что возмущение, действующее на систему, представляет собой пробный заряд с осциллирующей (нелокализованной) плотностью

$$\rho_1 \equiv \{A_k e^{-i(k \cdot r + \omega t)} + \text{Компл. сопр.}\}. \quad (5.3)$$

Оператор взаимодействия внешнего возмущения с электронным газом запишется в виде

$$\begin{aligned} H_1 &= e^2 \int \frac{\rho_1(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \\ &= e^2 e^{-i\omega t} A_k \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \int \frac{e^{-ik \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} d\mathbf{r} + \text{Компл. сопр.} = \\ &= e^2 e^{-i\omega t} A_k \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') e^{ik' \cdot \mathbf{r}'} \cdot \frac{4\pi}{k^2} + \text{Компл. сопр.} = \\ &= \frac{4\pi e^2}{k^2} A_k \rho_{-k} e^{i\omega t} + \text{Компл. сопр.} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Как отмечалось в гл. 4, выражение (5.4) можно понимать в том смысле, что в момент $t = -\infty$ взаимодействие начинает медленно включаться и при $t = 0$ устанавливается возмущенное стационарное состояние. Можно представлять себе, что выражение (5.4) умножается на $e^{\eta t}$; переходя к пределу $\eta \rightarrow 0$, получаем нужный результат. Такая процедура необходима при нахождении зависящего от времени отклика системы, к рассмотрению которого мы переходим.

Будем считать, что благодаря слабости взаимодействия с пробным зарядом возможно применение теории возмущений в низшем порядке. Пусть интересующая нас система — взаимодействующий электронный газ без учета внешнего возмущения

щения — описывается набором собственных функций Ψ_n , определяемых уравнением

$$H_0 \Psi_n = E_n \Psi_n. \quad (5.5)$$

Тогда возмущенную волновую функцию основного состояния можно записать в виде

$$\Psi(t) = \sum \Psi_n e^{-iE_n t/\hbar} a_n(t). \quad (5.6)$$

Коэффициенты этого разложения можно найти, как обычно, с помощью временной теории возмущений при условии $a_0(-\infty) = 1$, $a_n(-\infty) = 0$ ($n \neq 0$); в первом порядке получаем

$$a_n(t) = -\frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} \left[\frac{A_k \langle n | \rho_{-k} | 0 \rangle e^{i(-\omega + \omega_{n0})t + \eta t}}{-\omega + \omega_{n0} - i\eta} + \right. \\ \left. + \frac{A_k \langle n | \rho_k | 0 \rangle e^{i(\omega_{n0} + \omega)t + \eta t}}{\omega_{n0} + \omega - i\eta} \right], \quad (5.7)$$

где $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$ — точные частоты флюктуаций плотности ρ_k .

Вычислим среднее значение ρ_k по основному состоянию, описываемому возмущенной волновой функцией $\Psi(t)$, найденной в линейном по амплитудам A_k приближении, т. е. величину

$$\langle \rho_k \rangle = \langle \Psi(t) | \rho_k | \Psi(t) \rangle.$$

Используя (5.6) и (5.7) и учитывая, что в силу трансляционной инвариантности $\langle n | \rho_{-k} | 0 \rangle = 0$, если $\langle n | \rho_k | 0 \rangle \neq 0$, получаем

$$\langle \rho_k \rangle = -\frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} A_k e^{-i\omega t + \eta t} \times \\ \times \left[\sum_n |\langle n | \rho_k | 0 \rangle|^2 \left\{ \frac{1}{-\omega + \omega_{n0} - i\eta} + \frac{1}{\omega_{n0} + \omega + i\eta} \right\} \right]. \quad (5.8)$$

Наибольший интерес для нас представляет величина, являющаяся множителем при амплитуде A_k в правой части (5.8):

$$\frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} \sum_n |\langle n | \rho_k | 0 \rangle|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right\} \equiv \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1. \quad (5.9)$$

Соотношение (5.9) служит определением диэлектрической функции $\epsilon(k, \omega)$, тогда как величина $\epsilon_k(\omega)$, определяемая соотношением (4.19), является низшим приближением к указанному выражению.

1. Свойства диэлектрической функции

Дисперсионное уравнение. Объединяя (5.8) и (5.9), получаем

$$\frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 = \frac{\langle \rho_k \rangle}{A_k e^{-i\omega t}}. \quad (5.10)$$

Можно считать, что это соотношение устанавливает связь с макроскопическим описанием (ср. обсуждение диэлектрической проницаемости в приложении VI). Однако сейчас более важно отметить, что, вообще говоря, согласно (5.8) $\langle \rho_k \rangle \rightarrow 0$ при $A_k \rightarrow 0$. Это утверждение оказывается неверным, если член $\langle \rho_k \rangle / (A_k e^{-i\omega t})$ обращается в бесконечность; последнее в силу (5.10) имеет место при

$$\epsilon(k, \omega) = 0. \quad (5.11)$$

Таким образом, если k и ω удовлетворяют условию (5.11), система продолжает осциллировать даже после снятия возмущения. Уравнение (5.11) является точным дисперсионным уравнением для электронного газа.

2. Энергия электрон-электронного взаимодействия и правила сумм

Используем математические тождества

$$\frac{1}{x - i\eta} = \frac{P}{x} + i\pi\delta(x), \quad \frac{1}{x + i\eta} = \frac{P}{x} - i\pi\delta(x), \quad (5.12)$$

где P — символ главного значения, и возьмем мнимую часть соотношения (5.10); тогда получаем

$$\text{Im} \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} = -\frac{4\pi^2 e^2}{\hbar k^2} \sum_n |\langle n | \rho_k | 0 \rangle|^2 \{ \delta(\omega - \omega_{n0}) + \delta(\omega + \omega_{n0}) \}, \quad (5.13)$$

откуда следует, что

$$-\int \text{Im} \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} d\omega = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar k^2} \sum_n |\langle n | \rho_k | 0 \rangle|^2 = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar k^2} \langle 0 | \rho_k \rho_{-k} | 0 \rangle. \quad (5.14)$$

При переходе от (5.13) к (5.14) использовано свойство полноты системы функций Ψ_n и определение оператора ρ_k . Энергию электрон-электронного взаимодействия в основном состоянии можно выразить через диэлектрическую проницаемость; при этом получаем

$$E_{\text{взаим}} = \langle 0 | \mathcal{H}_{\text{кул}} | 0 \rangle = - \sum_k \left[\frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty \text{Im} \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} d\omega + \frac{2\pi N e^2}{k^2} \right]. \quad (5.15)$$

В принципе энергию основного состояния можно найти, если точно знать зависимость $E_{\text{взим}}$ от параметра r_s или эффективной константы связи e^2 . Ниже нам понадобится еще один результат, который можно получить, умножая (5.13) на частоту ω и далее интегрируя по ней. Это дает

$$\int_0^\infty \omega \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} d\omega = - \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar k^2} \sum_n |\langle n | \rho_{\mathbf{k}} | 0 \rangle|^2 \omega_{n0}. \quad (5.16)$$

Согласно известному результату, называемому правилом f -сумм (см. Пайнс [163]),

$$\sum_n \frac{2m}{\hbar k^2} \omega_{n0} |\langle n | \rho_{\mathbf{k}} | 0 \rangle|^2 = N, \quad (5.17)$$

откуда следует

$$\int_0^\infty \omega \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} d\omega = - \frac{\pi}{2} \left(\frac{4\pi Ne^2}{m} \right). \quad (5.18)$$

Наше общее рассмотрение позволяет также найти точную форму для $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ при $\omega \rightarrow \infty$; результат совпадает с получаемым в приближении случайных фаз (см. ниже), и поэтому мы не приводим здесь соответствующих выкладок.

§ 6. КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ВАН ХОВА

Проведенное выше рассмотрение диэлектрической функции $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ представляет собой удобный способ введения корреляционной функции $S(\mathbf{k}, \omega)$, впервые полученной Ван Ховом и играющей важную роль. Эта функция неоднократно встретится нам ниже, и здесь мы не будем рассматривать ее в наиболее общем виде. Достаточно сказать, что в соответствии с соотношением (5.14) важную роль играет величина

$$\langle 0 | \rho_{\mathbf{k}} \rho_{-\mathbf{k}} | 0 \rangle,$$

которая, как будет подробно показано ниже, равна структурному фактору $S(\mathbf{k})$, умноженному на N . Зависящая от частоты корреляционная функция Ван Хова является обобщением структурного фактора, а именно она связана с $S(\mathbf{k})$ следующим соотношением:

$$S(\mathbf{k}) = \int_0^\infty S(\mathbf{k}, \omega) d\omega. \quad (6.1)$$

Таким образом, объединяя (6.1) и (5.14), получаем

$$-\frac{4\pi^2 e^2}{\hbar k^2} S(k, \omega) = \text{Im} \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \quad (\omega > 0). \quad (6.2)$$

Используя (5.18), приходим к следующему выражению для первого момента частоты ω :

$$\int_0^\infty \omega S(k, \omega) d\omega = \frac{N\hbar k^2}{2m}. \quad (6.3)$$

Отсюда видно, что описания электронного газа с помощью функций $\epsilon(k, \omega)$ или $S(k, \omega)$ фактически эквивалентны, но, как уже указывалось, функция Ван Хова имеет более широкую область применимости (см. гл. 8).

§ 7. СВЯЗЬ С ТЕОРИЕЙ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ

Достоинство развитого выше формализма, основанного на использовании диэлектрической функции, состоит в его общности, однако для практического применения соотношения (5.13) необходимо строить приближения для точных волновых функций Ψ_n . В пределе высокой плотности такое приближение состоит в замене частот ω_n соответствующими значениями для системы свободных электронов, и хотя таким способом можно провести вычисление величины $\langle p_k \rangle$, определяемой соотношением (5.10), мы приходим к результату, полученному в § 4 с помощью гамильтонiana Савады. Соотношение (4.19) фактически как раз и дает величину $\epsilon(k, \omega)$ в приближении высокой плотности, и, как мы сейчас увидим, из этого соотношения можно непосредственно получить различные частные случаи.

а) Положив $\omega = 0$, получаем экранирование статического заряда, изученное в § 2 в приближении Хартри. При этом можно считать, что каждая компонента $V(k)$ экранируется независимо и становится равной $-V(k)/\epsilon(k, 0)$. Выражение для статической диэлектрической проницаемости можно получить тогда либо из (4.20), либо из (2.7); оно имеет вид

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{q_0^2}{k^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_f}{2k} \left(1 - \frac{k^2}{4k_f^2} \right) \ln \left| \frac{k+2k_f}{k-2k_f} \right| \right]. \quad (7.1)$$

б) Для очень высоких частот из (4.20) непосредственно следует

$$\epsilon(k, \omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}; \quad (7.2)$$

как подчеркивалось выше, этот результат имеет универсальную применимость в высокочастотном пределе.

в) Для малых k получаем из (4.20)

$$\epsilon(k, \omega) \approx 1 + \frac{q_0^2}{k^2}. \quad (7.3)$$

§ 8. ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ

До сих пор в нашем рассмотрении предполагалось, что электроны слабо взаимодействуют друг с другом, поэтому с известным основанием можно было применять теорию возмущений. Однако плотность электронов в реальных металлах лежит в интервале $2 < r_s < 5,5$ (использованы атомные единицы), тогда как приближение высокой плотности справедливо при $r_s \ll 1$.

Несмотря на это, существует много свидетельств экспериментального и теоретического характера, показывающих, что свойства электронного газа, рассмотренные выше в приближении высокой плотности, соответствуют реальному поведению электронов проводимости в металлах [важное исключение составляет выражение для корреляционной энергии (3.22)]. Тем не менее весьма интересно рассмотреть случай сильной связи или приближение низкой плотности.

Наше рассмотрение будет основано на интуитивных соображениях. Напомним кратко выводы, полученные в гл. 2. При описании молекулы H_2 мы могли использовать в качестве отправного пункта либо представление о молекулярных орбиталях, в которых каждый электрон принадлежит всей системе (так что его орбита захватывает всю молекулу), либо представление о локализованных орбиталях. Очевидно, аналогом молекулярных орбиталей молекулы H_2 в электронном газе являются плоские волны e^{ikr} , на которых строилось приближение высокой плотности. Известно, что детерминант, состоящий из плоских волн, всегда можно выразить через локализованные орбитали, или функции Ванье. Однако, как мы увидим ниже, функции Ванье, полученные из плоских волн, дают очень плохое приближение в случае электронного газа низкой плотности.

Изложенные выше соображения показывают, что необходимо отказаться от молекулярных орбиталей и по аналогии с подходом Гайтлера — Лондона в теории молекулы H_2 проанализировать роль электронных взаимодействий с физической точки зрения. Можно считать, что в том случае, когда атомы удалены на большие расстояния, кулоновское отталкивание, действующее между двумя электронами, удерживает эти электроны на их „собственных“ атомах и препятствует любой попытке электронов

занять молекулярные орбитали. Разумеется, в электронном газе физическая картина совсем другая, тем не менее можно считать, что в пределе сильной связи электрон может находиться лишь в „принадлежащей“ ему области пространства. (Это соответствует использованному в теории молекулы H_2 способу эффективной минимизации кулоновской энергии, который заключается в „привязывании“ каждого электрона к „своему“ атому.)

Как показал Вигнер [203, 204], если взаимодействия между электронами становятся достаточно сильными, то наиболее эффективным оказывается их расположение в узлах решетки. В предельном случае сильной связи энергия такой электронной решетки является чисто электростатической. Из исследованных до сих пор структур наименее энергией обладает объемно-центрированная кубическая решетка (см., например, [70]). Приходящуюся на одну частицу энергию (в ридбергах) можно записать в следующем виде:

$$\frac{E}{N} = - \frac{1,792}{r_s}. \quad (8.1)$$

Эта энергия лежит значительно ниже обменной энергии, которая равна $-0,916 r_s^{-1}$ ридберг. Если мы слегка ослабим взаимодействие, то электроны, очевидно, начнут колебаться вблизи узлов решетки; подробное рассмотрение этого движения на базе волновой механики проведено в работе Карра [39]. Для наших целей достаточно проиллюстрировать основные физические моменты с помощью более простого рассмотрения колебаний электронов, основанного на модели Эйнштейна.

1. Осцилляторные волновые функции (орбитали Вигнера) и полная энергия

Предположим, что взаимодействие между электронами настолько сильно, что электроны могут совершать лишь малые колебания вблизи соответствующих узлов решетки. Тогда поле, в котором колеблются электроны, можно построить, рассматривая ячейку Вигнера — Зейтца и заменяя ее сферой (такая замена допустима в силу высокой симметрии ячейки Вигнера — Зейтца). Далее, единственный существенный потенциал, действующий на электрон, — это потенциал положительного заряда, распределенного внутри данной сферы. Остальные ячейки в силу своей высокой симметрии дают лишь мультипольные вклады в потенциал рассматриваемой центральной ячейки. Таким обра-

зом, потенциальная энергия поля сил, в котором движется электрон, равна

$$-\frac{e^2 r^2}{2r_s^2} + \text{const}, \quad (8.2)$$

а волновая функция основного состояния электрона совпадает с волновой функцией трехмерного изотропного гармонического осциллятора, именно

$$\Psi = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{3/4} e^{-(ar^2)/2}, \quad a = r_s^{-3/2}. \quad (8.3)$$

В этом приближении кинетическая энергия, приходящаяся на одну частицу, $T/N = 3/(2r_s^{3/2})$ ридберг; следовательно, для полной энергии получаем

$$\frac{E}{N} = -\frac{1,792}{r_s} + \frac{3}{r_s^{3/2}} + \dots \quad (8.4)$$

(здесь учтено, что кинетическая и потенциальная энергии дают одинаковый вклад в энергию гармонического осциллятора).

При тщательных вычислениях, основанных на правильном учете динамики решетки (в отличие от использованной выше модели Эйнштейна), в члене с $r_s^{-3/2}$ появляется коэффициент 2,66 [39, 46].

Рассмотрев вопрос о средней энергии в предельных случаях слабой и сильной связи, кратко обсудим случай промежуточной плотности.

§ 9. СЛУЧАЙ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ПЛОТНОСТЕЙ

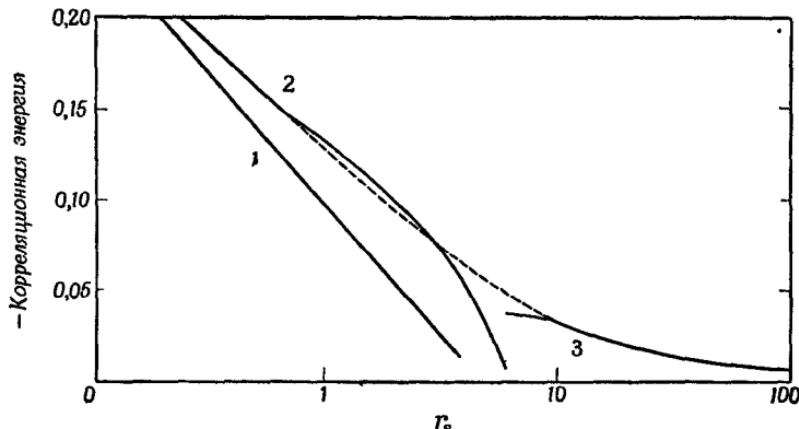
Имеющиеся в настоящее время вычисления носят фактически характер интерполяционных схем. В цитированной выше ранней работе Вигнера были получены выражения для корреляционных энергий, которые нашли подтверждение в последующих работах. Для грубой интерполяции Вигнер использовал формулу

$$\epsilon_{\text{корр}} = -\frac{0,88}{r_s + 7,8} \text{ ридберг}, \quad (9.1)$$

однако эта формула была получена до создания теории для случая высокой плотности; она дает слишком грубое приближение при $r_s \rightarrow 0$.

К числу наиболее точных оценок все еще принадлежат результаты, полученные в первых работах Хаббарда (см. также недавнюю работу Райса [171], в которой проведено вычисление обменных членов методом, близким к методу Хаббарда), однако процесс интерполяции был исчерпывающим образом исследован Нозьером и Пайнсом [157] и Карром [41]. Исследован и другой

подход, основанный на использовании многочастичной волновой функции, имеющей вид детерминанта, умноженного на произведение двухчастичных корреляционных функций. В частности, этим вопросом занимался Гаскелл [75], использовавший колективные переменные; при этом вновь было получено значение корреляционной энергии, хорошо согласующееся с результатами других авторов.



Фиг. 45. Корреляционная энергия (в ридбергах) как функция плотности газа r_s (в атомных единицах).

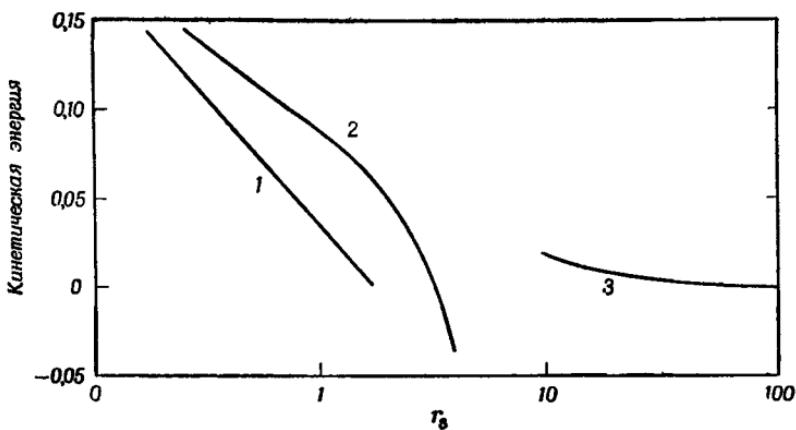
1 — результат Гелл-Манна — Бракнера: $0,0622 \ln r_s - 0,096$; 2 — лучший из известных результат для высокой плотности [40]; 3 — кривая, полученная с помощью теории для случая низкой плотности [41]; пунктируя линия — интерполяция.

На фиг. 45 представлены некоторые результаты, полученные к настоящему времени. Отметим, что в том случае, когда зависимость полной энергии E , приходящейся на частицу, от величины r_s известна, кинетическую и потенциальную энергии можно получить с помощью теоремы вириала [139], которая принимает следующий вид:

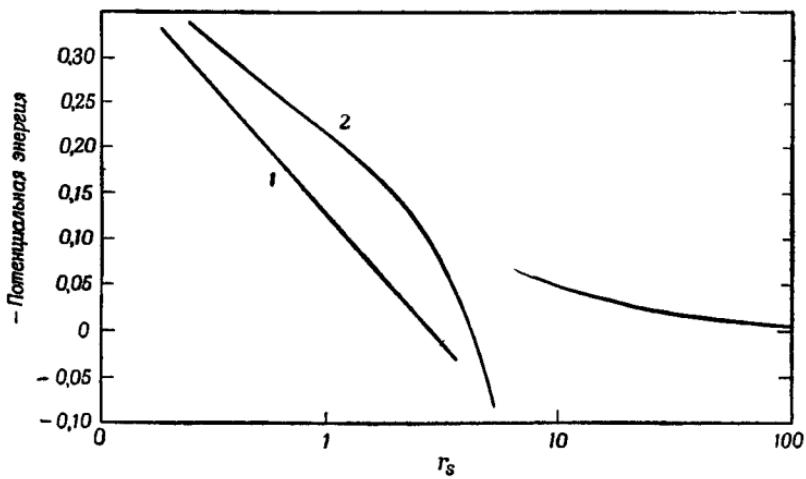
$$2T + V = -r_s \frac{dE}{dr_s}. \quad (9.2)$$

Уравнение (9.2) становится почти очевидным, если заметить, что в том случае, когда левая часть равна нулю, мы получаем обычную форму теоремы вириала для системы, находящейся в равновесии под действием чисто кулоновских сил. Можно считать, что правая часть в (9.2) является вириалом $3p\Omega$ от давления p , обусловленного бомбардировкой стенок сосуда электронным газом. Как известно из термодинамики, при абсолютном нуле $p = -dE/d\Omega$, откуда и следует уравнение (9.2).

На фиг. 46 и 47 представлены слагаемые полной корреляционной энергии, а именно кинетическая энергия (T) и потенциальная энергия (V). В частности, предельные выражения для



Фиг. 46. Изменение кинетической энергии как функция r_s .
Обозначения соответствуют фиг. 45.



Фиг. 47. Изменение потенциальной энергии как функция r_s .
Обозначения соответствуют фиг. 45.

T и V в случае $r_s \rightarrow 0$ можно найти из формулы Гелл-Манна — Бракнера для энергии; они имеют следующий вид:

$$T = \bar{E}_f - A \ln r_s - (A + C) + \dots \quad (9.3)$$

и

$$V = V_{\text{обм}} + 2A \ln r_s + (A + 2C), \quad (9.4)$$

где $A = (2/\pi^2)(1 - \ln 2)$, $C = -0,096$,

$$\bar{E}_f = 2,21r_s^{-2}, \quad V_{\text{обм}} = -0,916r_s^{-1}.$$

Как уже отмечалось выше, корреляции должны всегда переводить частицы в состояния, лежащие вне сферы Ферми, увеличивая тем самым кинетическую энергию; это отчетливо видно на фиг. 46. С физической точки зрения можно дать следующее объяснение тому, что зависимость от r_s кинетической энергии T , которая для газа высокой плотности пропорциональна энергии Ферми, т. е. r_s^{-2} , заменяется в случае газа низкой плотности зависимостью вида $r_s^{-3/2}$. Вид волновой функции электронов (8.3) указывает на их пространственную локализацию; именно, электроны занимают лишь часть полного объема, пропорциональную $r_s^{-3/2}$, а поскольку энергия Ферми пропорциональна $(N/Q)^{1/3}$, получаем, что кинетическая энергия пропорциональна $(1/r_s^2)(r_s^{3/4})^{2/3}$, или $(r_s)^{-5/2}$, т. е. искомую зависимость (ср. [39]).

Фактически механизм осуществления указанной локализации при переходе через область промежуточных плотностей, вероятно, очень сложен. Мы считаем, что в настоящее время лучший метод изучения электронного газа промежуточной плотности основан на применении вариационной теоремы (см. работу Гаскелла [75], в которой, однако, для практических вычислений использовалось приближение случайных фаз). Можно ожидать, что дальнейшее развитие пойдет по линии разработки вариационных методов, 'основанных' на функциях Грина или матрицах плотности. Здесь остается много нерешенных проблем, связанных с формулировкой необходимых и достаточных условий применимости метода функций Грина или метода двухчастичной матрицы плотности для вариационной процедуры (см., например, [149, 195, 207]).

§ 10. ЗАВИСИМОСТЬ ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ И ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО ИМПУЛЬСАМ ОТ ПЛОТНОСТИ ГАЗА

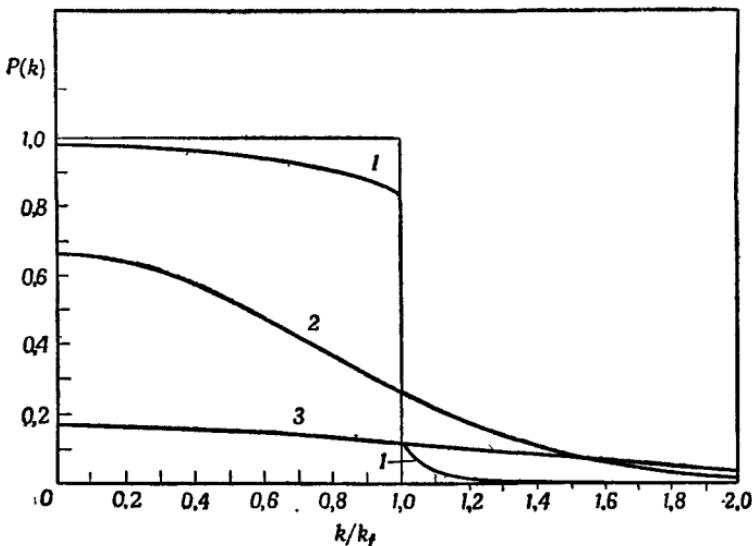
Подробно рассмотрев газ высокой плотности и полукачественно оценив предел сильной связи, обратимся в заключение к обсуждению формы парной корреляционной функции и функции распределения по импульсам при изменяющемся расстоянии между частицами r_s .

1. Функция распределения по импульсам

Рассмотрим прежде всего вероятность $P(k)$ заполнения состояния \mathbf{k} . Очевидно, что, когда плотность становится очень высокой, $P(k)$ стремится к обычному распределению Ферми

$$P(k) = \begin{cases} 1 & (k < k_f), \\ 0 & (k > k_f). \end{cases} \quad (10.1)$$

Если мы включаем взаимодействия, то строго проследить изменение функции распределения (10.1) весьма затруднительно. При



Фиг. 48. Функция распределения по импульсам.

1 — приближение высокой плотности для $r_s = 2$; 2 — приближение низкой плотности (10.2) для $r_s = 4$; 3 — приближение низкой плотности (10.2) для $r_s = 100$.

любом подходе с использованием теории возмущений очевидно, что функция распределения сохранит разрыв при $k = k_f$, хотя величина его уменьшится, так как наличие взаимодействия непременно приведет к тому, что некоторые частицы окажутся вне сферы Ферми.

Даниэл и Воско [50] провели вычисление $P(k)$ с помощью теории возмущений в приближении высокой плотности. Мы не даем здесь подробного изложения результатов этих вычислений; ограничимся лишь указанием на то, что величина разрыва при $k = k_f$ уменьшается с увеличением плотности (эти результаты представлены кривой 1 на фиг. 48 для $r_s = 2$).

Обратимся, далее, к пределу сильной связи. Марч и Семпантхар [143] провели полукаличественное рассмотрение этого случая, пользуясь методом орбиталей Вигнера (см. § 6, п. 1). Оказывается, что в этом случае функция распределения по импульсам является просто фурье-образом орбитали Вигнера и имеет вид

$$P(K) = \frac{3\pi^{1/2}}{r_s^{3/4}} \exp \left[- \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{2/3} r_s^{-1/2} K^2 \right], \quad (10.2)$$

где $K = k/k_f$. Отметим, что соответствующая бессpinовая одиночичная матрица плотности записывается следующим образом:

$$\gamma(\mathbf{r}'\mathbf{r}) = \frac{k_f^3}{3\pi^2} \exp \left(- \frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2}{4r_s^{3/2}} \right); \quad (10.3)$$

такая матрица плотности дает правильное значение однородной плотности частиц, равное $k_f^3/3\pi^2$.

Область применимости выражений (10.2) и (10.3) ограничена, поскольку использовалось предположение об ортогональности орбиталей Вигнера. Необходимое (но не достаточное) условие применимости (10.2) состоит в том, что должно выполняться неравенство $0 < P(K) < 1$, откуда вытекает требование

$$\frac{3\pi^{1/2}}{r_s^{3/4}} < 1, \quad (10.4)$$

или $r_s > 9,3$.

Подчеркнем, что в пределе сильной связи не остается и следа от разрывного поведения, характерного для слабо взаимодействующих фермионов. Можно показать, что при достаточно низкой плотности этот вывод сохраняет силу, если провести ортогонализацию орбиталей Вигнера по отношению друг к другу.

2. Смысл поверхности Ферми

Рассмотрим изменение функции распределения по импульсам, начиная с предельного случая малых r_s . Обсуждавшиеся выше факты подтверждают представление о том, что при этом константа взаимодействия (или плотность) обязательно переходит через критическое значение, при котором разрыв функции распределения по импульсам исчезает. Для плотностей, меньших критической, представление о поверхности Ферми окажется, вероятно, менее полезным. Однако до сих пор не было проведено количественной оценки критической плотности. Остается неясным также вопрос о природе „перехода“, происходящего при критической плотности, и порядке этого перехода. Все

имеющиеся для металлов факты свидетельствуют о том, что указанный переход происходит при $r_s \gg 5,5$ (значение 5,5 характеризует цезий — металл с самой низкой электронной плотностью).

3. Парная корреляционная функция

Парную корреляционную функцию для системы невзаимодействующих фермионов легко получить из бесспиновой двухчастичной матрицы плотности. Эта парная корреляционная функция (нормированная на единицу на больших расстояниях) имеет вид

$$g(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = 1 - \frac{9}{2} \left[\frac{j_1(k_f |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)}{k_f |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \right]^2, \quad (10.5)$$

где

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho - \rho \cos \rho}{\rho^2}.$$

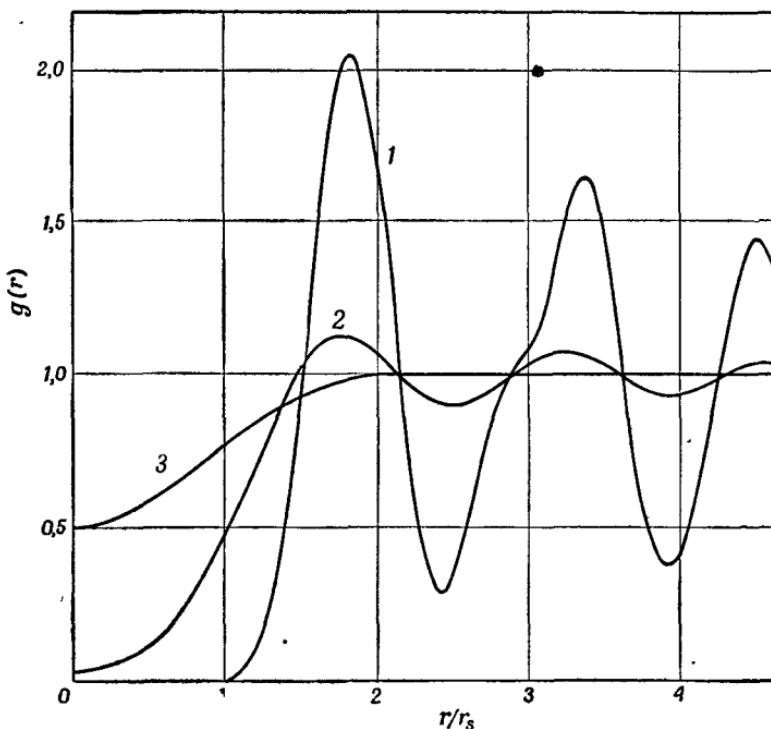
Для учета влияния взаимодействий между электронами в выражении (10.5) некоторые авторы [196, 143] проводили вычисления в приближении высокой плотности с применением теории возмущений; в работе [196] приведены графики нескольких модифицированных функций (10.5) для различных r_s .

Однако использование метода коллективных переменных, применявшегося Гаскеллом [75, 76], позволяет получить и некоторые аналитические результаты, описывающие эффект взаимодействия. Невозмущенная форма (10.5) убывает на больших расстояниях r как $[\cos^2(k_f r)]/r^4$, или $[1 + \cos 2k_f r]/r^4$. Было показано¹⁾, что наличие взаимодействия приводит к исчезновению члена с r^{-4} ; таким образом, остается лишь зависимость вида $r^{-4} \cos 2k_f r$. Интересно отметить отличие от случая распределения электронов вокруг статического бесспинового заряда, которое убывает как $r^{-3} \cos 2k_f r$ (см. § 2, п. 1).

Все эти вычисления применимы только в пределе высокой плотности. В электронном газе низкой плотности парную функцию можно построить непосредственно из орбиталей Вигнера, если взять среднее по углам от суммы квадратов этих орбиталей с центрами в каждом узле объемноцентрированной кубической решетки (исключая узел, совпадающий с началом координат). Результаты такого усреднения представлены кривыми 1 и 2 на фиг. 49. Кривая 3 соответствует невзаимодействующей фермиевской дырке; осцилляции этой функции, остающейся по величине меньше единицы, неразличимы при графическом изображении. Зато ясно видно, что при понижении

¹⁾ Gaskell, Jones, March, неопубликованная работа.

плотности осцилляции усиливаются, и функция g может намного превосходить единицу. Кривая 2, построенная в приближении низкой плотности, была экстраполирована к $r_s = 4$, хотя следует помнить, что такое значение плотности выходит за пределы



Фиг. 49. Парная функция.

1 — приближение низкой плотности для $r_s = 100$, 2 — приближение низкой плотности для $r_s = 4$; 3 — фермиевская дырка.

применимости теории. Эта кривая, возможно, отображает общее поведение парной корреляционной функции при плотностях, характерных для реального металла (ср. [75, 76]), хотя амплитуда осцилляций почти наверное значительно завышена.

§ 11. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Рассмотрим теперь различные свойства взаимодействующего электронного газа. Из сказанного выше следует, что наиболее точные вычисления можно провести только в случае высокой плотности. Однако там, где это возможно, мы постараемся рассмотреть также результаты для случая низкой плотности.

1. Удельная теплоемкость

Из элементарной зонной теории (см., например, книгу Займана [211]) хорошо известно, что удельная электронная теплоемкость C_v выражается через плотность состояний $N(\epsilon_f)$ на поверхности Ферми следующим образом:

$$C_v = \left(\frac{1}{3} \pi^2 \right) k^2 T N(\epsilon_f). \quad (11.1)$$

С помощью простых выкладок можно выразить теплоемкость через импульс Ферми k_f :

$$\frac{C_v}{N} = \frac{\pi^2 k^2 T}{k_f (d\epsilon/dk)_{k_f}}. \quad (11.2)$$

Здесь $\epsilon(k)$ — энергия возбуждения квазичастиц в общем случае; эта величина вычислялась приближенно на основе представления о плазменных колебаниях, развитого Бомом и Пайнсом. В приложении IV показано, что на поверхности Ферми производную $(d\epsilon/dk)_{k_f}$ можно вычислить точно в приближении высокой плотности (впервые такие вычисления провел Гелл-Манн [77]). Основной результат имеет вид

$$\left(\frac{d\epsilon}{dk} \right)_{k_f} = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{2}{\pi r_s} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{2 \left[1 + 4 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{r_s}{\pi} \frac{1}{2(1-x)} \right]}; \quad (11.3)$$

вычисляя основные члены в (11.3) и используя (11.2), без труда находим

$$C_v = C_v^0 [1 + 0,083 r_s (-\ln r_s - 0,203) + \dots]^{-1}, \quad (11.4)$$

где C_v^0 — удельная электронная теплоемкость невзаимодействующего ферми-газа. К сожалению, сравнивать выражение (11.4) с экспериментом весьма затруднительно, во-первых, потому, что оно применимо лишь в области малых значений r_s , во-вторых, потому, что при его выводе мы пренебрегли эффектами, связанными с блоховским характером волновых функций электрона, т. е. влиянием границ зон Бриллюэна.

В пределе низкой плотности, как мы видели, электроны колеблются вокруг узлов регулярной решетки; очевидно, что при правильном учете коллективного характера нормальных колебаний последние дадут вклад в C_v , пропорциональный T^3 . Более детальные вычисления [39] показывают, что „низкотемпературная“ удельная теплоемкость в расчете на частицу равна

$$C_v = 62 k r_s^{9/2} [(kT)_{\text{приблиз.}}]^3. \quad (11.5)$$

В работе [45], в которой использован несолько иной подход, получена та же формула с небольшим отличием в численном коэффициенте (56 вместо 62).

Значение C_v , вычисленное по формуле (11.5), мало; это объясняется большой скоростью звука. Необычное свойство, выявляющееся при рассмотрении динамики решетки, состоит в том, что вклад в C_v дают только поперечные колебания, тогда как продольная ветвь является в данном случае оптической. Нетрудно найти „температуру Дебая“, связанную с теплоемкостью (11.5); она имеет вид

$$2,45 \cdot 10^5 r_s^{-3/2} \text{°К.}$$

Несмотря на то что выражение (11.5) представляет теоретический интерес, поскольку оно соответствует предельному случаю сильной связи, в настоящее время его трудно сопоставить с экспериментом, и мы не будем им больше заниматься.

2. Магнитные свойства

a) Парамагнитная восприимчивость. При вычислении энергии методом Гелл-Манна и Бракнера [см. приложение IV, соотношение (4П.13)] вводится функция $Q_q(u)$. Когда включается магнитное поле (например, при элементарном рассмотрении спиновой восприимчивости Паули), электроны со спином „вверх“ заполняют сферу Ферми радиусом k_f^+ , а электроны со спином „вниз“ — сферу Ферми радиусом k_f^- . В выражении для корреляционной энергии, приходящейся на частицу, которое получается при суммировании всех кольцевых диаграмм, достаточно просто заменить $Q_q(u)$ на

$$\frac{1}{2} (Q_q^+(u) + Q_q^-(u)),$$

где знаки „+“ и „—“ относятся к различным фермиевским волновым числам k_f^+ и k_f^- .

Тогда корреляционную энергию (в ридбергах), приходящуюся на частицу, можно сразу выразить через относительную намагниченность $\zeta = (N_+ - N_-)/N$ (все обозначения очевидны):

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{корр}}(\zeta) = & -\frac{3}{4\pi^3} \int_0^\infty \frac{dq}{q} \int_{-\infty}^\infty du \sum_{n=2}^\infty \frac{(-1)^n}{n} \times \\ & \times \left[\frac{Q_q^+(u) + Q_q^-(u)}{2} \right]^2 \left(\frac{ar_s}{\pi q^2} \right)^{n-2}. \end{aligned} \quad (11.6)$$

Приближенное выражение для $\epsilon_{\text{корр}}(\zeta)$ можно получить, заменив в (11.6) Q_q на Q_0 , а верхний предел интегрирования по q — единицей. Однако для учета вклада второго порядка, возникающего за счет значений q , превышающих единицу, к получившемуся выражению следует добавить поправку $\Delta(\zeta)$; в результате находим

$$\epsilon_{\text{корр}}(\zeta) = - \frac{3}{4\pi^5} \int_0^1 \frac{dq}{q} \int_{-\infty}^{\infty} du \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \times \\ \times \left[\frac{Q_0^+(u) + Q_0^-(u)}{2} \right]^n \left(\frac{ar_s}{\pi q^2} \right)^{n-2} + \Delta(\zeta), \quad (11.7)$$

где

$$\Delta(\zeta) = \frac{3}{8\pi^5} \int_0^1 \frac{dq}{q} \int_{-\infty}^{\infty} du \left[\frac{Q_0^+(u) + Q_0^-(u)}{2} \right]^2 - \\ - \frac{3}{32\pi^6} \int_0^1 \frac{dq}{q^3} \int_{-\infty}^{\infty} du \left[\frac{Q_q^+(u) + Q_q^-(u)}{2} \right]^2. \quad (11.8)$$

Вычисляя написанные выражения в основном порядке по ζ , получаем

$$\epsilon_{\text{корр}}(\zeta) = \epsilon_{\text{корр}}(0) - \frac{\zeta^2}{6\pi^2} \left\{ \ln \frac{4ar_s}{\pi} + \langle \ln R \rangle_{\text{cp}} \right\} + \frac{\zeta^2}{3\pi^3} \left\{ \ln 2 + \frac{1}{2} \right\}, \quad (11.9)$$

где

$$\langle \ln R \rangle_{\text{cp}} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} du \frac{R(u)}{(1+u^2)^2} \ln R}{\int_{-\infty}^{\infty} du \frac{R(u)}{(1+u^2)^2}}. \quad (11.10)$$

Величина R вводится в приложении IV следующим образом:

$$R(u) = 1 - u \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{u} \right). \quad (11.11)$$

Суммируя вклад $\epsilon_{\text{корр}}(\zeta) - \epsilon_{\text{корр}}(0)$ с изменениями в кинетической и обменной энергиях, вычисленными с точностью до ζ^2 , можно обычным образом найти магнитную восприимчивость.

Интересно отметить, что вычисленное указанным способом отношение парамагнитной спиновой восприимчивости χ к значению восприимчивости χ_0 для невзаимодействующего фермигаза не совпадает с отношением удельных теплоемкостей C_v/C_v^0 ,

вычисленными в п. 1, хотя, казалось бы, эти отношения должны совпадать, поскольку как C_v , так и χ пропорциональны плотности состояний на поверхности Ферми. Однако здесь следует учитывать также изменение гиromагнитного отношения от величины γ_0 до $\gamma(k_f)$ на поверхности Ферми; согласно [32], отношение этих величин равно

$$\frac{\gamma(k_f)}{\gamma_0} = \left\{ 1 - \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{2}{\pi r_s} \int_{-1}^1 \frac{dx}{2(1-x) \left[1 + 4 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{r_s}{\pi} \frac{1}{2(1-x)} \right]} \right\}^{-1}. \quad (11.12)$$

Умножая отношение удельных теплоемкостей на величину (11.12), получаем правильное значение для спиновой восприимчивости Паули, вычисленной выше в пределе высокой плотности.

б) *Диамагнетизм.* Труднее учесть влияние взаимодействий между электронами на диамагнетизм Ландау. Мы не будем заниматься здесь этим вопросом подробно, заметим лишь, что Каназава и др. [109, 110] исследовали указанную проблему методом функций Грина, описанным в гл. 10. Основной результат заключается в том, что в пределе высокой плотности диамагнетизм видоизменяется, причем ведущая поправка к результату Ландау имеет вид $r_s \ln r_s$. Коэффициент при этом члене был получен ранее Марчем и Донованом [140] на основе теории Бома — Пайнса, однако подход Каназавы применим также в высших порядках. Дальнейшие детали читатель может найти в оригинальных работах.

в) *Результаты для случая низкой плотности.* Карр [39] подробно показал, что, по-видимому, во всех представляющих практический интерес случаях электронный газ низкой плотности можно считать антиферромагнитным (ранее это соображение использовалось Марчем и Янгом [144] при построении модели газа низкой плотности). Иначе говоря, можно считать, что объемноцентрированная кубическая решетка состоит из двух взаимно проникающих простых кубических решеток, в одной из которых спины направлены „вверх“, а в другой — „вниз“.

Фактически если орбитали Вигнера не перекрываются, то ферро- и антиферромагнитное состояния имеют одинаковую энергию. Изучение обменного интеграла между орбитальными Вигнера в принципе несложно, но довольно громоздко. Не входя в подробности, мы ограничимся здесь тем, что приведем грубую оценку Карра для температуры Нееля:

$$T_N \sim 1,6 \cdot 10^5 \left[13r_s^{-1} - 3,2r_s^{-3/4} \right] e^{-1,55r_s^{1/2}} \text{ K.}$$

Вычисления показывают, что в пределе $r_s \rightarrow \infty$ в системе устанавливается ферромагнитное состояние, однако это про-

исходит при столь больших значениях r_s , что соответствующая температура Кюри исчезающе мала.

В заключение следует подчеркнуть, что строгое изучение устойчивости электронного газа по отношению к магнитным переходам представляется чрезвычайно сложной проблемой. Даже в приближении Хартри — Фока результаты не вполне однозначны, хотя Оверхаузер [158] убедительно показал, что обычное парамагнитное состояние неустойчиво по отношению к образованию волн спиновой плотности даже в пределе $r_s \rightarrow 0$. Правда, несколько раньше Блох показал, по-прежнему без учета корреляций, что в отношении обменной энергии параллельное расположение спинов является достаточно энергетически выгодным, чтобы вызвать переход в ферромагнитное состояние при плотностях газа, соответствующих $r_s \sim 6$. Однако при точном рассмотрении магнитных свойств основного состояния учет корреляционных эффектов совершенно необходим; при этом оказывается, что за редкими исключениями (как, например, в упомянутом выше предельном случае $r_s \rightarrow \infty$) ферромагнетизм в электронном газе Зоммерфельда никогда не устанавливается (см., однако, [151]).

§ 12. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Покажем, что характеристические энергетические потери быстрых электронов, двигающихся через электронный газ, непосредственно связаны с плазменными колебаниями. Скорость электрона должна быть достаточно высокой, чтобы имело смысл борновское приближение; тогда можно без особых труда показать, что скорость передачи энергии металлу прямо связана с зависящей от частоты и волнового вектора диэлектрической проницаемостью.

Прежде всего можно сказать, что гамильтониан взаимодействия с металлом быстрого электрона, находящегося в точке R , имеет вид

$$H_{\text{взаим}} = \sum_i \frac{e^2}{|r_i - R|} = \sum'_{i\mathbf{q}} \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} e^{i\mathbf{q} \cdot (r_i - R)} = \sum'_{\mathbf{q}} \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \rho_{-\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot R}. \quad (12.1)$$

Если электрон только рассеивается на малый угол, можно написать $R = vt$, так что эффективная передача энергии ω равна $\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}$. С другой стороны, потерю энергии ω можно приблизенно записать в следующем виде:

$$\omega = \frac{k^2}{2m} - \frac{(k - q)^2}{2m} = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m} - \frac{q^2}{2m} \approx \mathbf{v} \cdot \mathbf{q}, \quad (12.2)$$

поскольку $k \gg q$. Тогда, согласно обычной временной теории возмущений, вероятность того, что электрон передаст системе импульс \mathbf{q} и энергию $\omega = \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}$, равна

$$\frac{dP(\mathbf{q}, \omega)}{dt} = 2\pi \left(\frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \right)^2 \sum_n (\rho_{\mathbf{q}})_{n0}^2 \delta(\omega_{n0} - \omega), \quad (12.3)$$

где суммирование распространяется на все возможные состояния n . Потеря энергии равна

$$\frac{d}{dt} W(\mathbf{q}, \omega) = \omega \frac{dP(\mathbf{q}, \omega)}{dt}, \quad (12.4)$$

откуда следует искомый результат:

$$\frac{d}{dt} W(\mathbf{q}, \omega) = - \frac{8\pi e^2}{q^2 \Omega} \omega \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right). \quad (12.5)$$

Привлекая соотношение между диэлектрической функцией и функцией $S(\mathbf{q}, \omega)$, находим из (12.5), что потери энергии в принципе определяются корреляционной функцией Ван Хова.

На основе уравнения (12.5) можно экспериментально определять плазменные частоты, поскольку, согласно (12.5), эти частоты являются резонансными для потерь энергии (см. [174]; ср. также (5.11)).

На этом мы заканчиваем рассмотрение микроскопической теории. Развитая ниже, в § 13, феноменологическая теория в принципе применима к электронному газу; однако, поскольку выше мы рассмотрели эту проблему достаточно подробно, ограничимся в дальнейшем изложением общей теории и опишем кратко ее применение к жидкому He^3 . Такой подход вполне уместен, ввиду того что теория ферми-жидкости впервые была развита Ландау именно для объяснения низкотемпературных свойств этой квантовой жидкости.

§ 13 ТЕОРИЯ ФЕРМИ-ЖИДКОСТИ И He^3

Использование термина „жидкость“ в теории ферми-жидкости означает, что здесь простейшее представление о возбужденном состоянии как наборе независимых квазичастиц является уже недостаточным, поэтому необходимо включить в теорию взаимодействие между квазичастицами. Первоначальная формулировка теории ферми-жидкости, предложенная Ландау [118, 119], была интуитивной и полуфеноменологической. Ландау предполагал существование отдельных квазичастиц с энергией E_K^0 и взаимодействия между квазичастицами $f(K, K')$ [см. (13.2) и (13.3)] и выразил различные наблюдаемые физические величины через E_K^0 и $f(K, K')$. С помощью этой теории удалось

предсказать ряд правильных функциональных связей (в особенности зависимость от температуры). Учитывая неточность величины $f(K, K')$ (индекс K обозначает импульс и спин), можно сказать, что теория является даже полукаличественной.

Мы должны считать с самого начала, что взаимодействующая система обладает одночастичным спектром фермиевского типа. [Это не всегда верно, даже если система состоит из частиц со спином $1/2$. Приведем пример Ландау: жидкий дейтерий имеет спектр бозевского типа (ср. гл. 8), поскольку атомы дейтерия соединяются и образуют молекулу.] Таким образом, можно считать, как это делалось в гл. 1, § 11, что для вычисления одночастичного спектра мы свели исходный многочастичный гамильтониан к гамильтониану, описывающему набор N квазифермионов с теми же пространственно-спиновыми индексами K , как и у их невзаимодействующих аналогов, причем уровень Ферми k_f у квазичастиц и у независимых частиц совпадает.

Рассмотрим теперь состояние системы, близкое к основному, и пусть распределение квазичастиц в нем имеет вид

$$n_K = n_K^0 + \delta n_K, \quad (13.1)$$

где n_K^0 — обычная ступенчатая функция Ферми. Отправной пункт теории Ландау состоит в том, что энергия возмущенного состояния записывается в виде

$$\delta E = E - E_0 = \sum_K \epsilon_K^0 \delta n_K + \frac{1}{2} \sum_{K \neq K'} f(K, K') \delta n_K \delta n_{K'}, \quad (13.2)$$

а одночастичный спектр — в виде

$$\delta \epsilon_K = \epsilon_K - \epsilon_K^0 = \sum_{K' (\neq K)} f(K, K') \delta n_{K'}, \quad (13.3)$$

где E_0 — энергия основного состояния (с учетом взаимодействия), ϵ_K^0 — одночастичная энергия возбуждения в отсутствие любых других возбуждений, а $f(K, K')$ — энергия взаимодействия между двумя различными возбуждениями K и K' . Отметим сходство между этими выражениями и результатами теории Хартри — Фока (см. гл. 3).

Явная связь с термодинамикой устанавливается с помощью соотношения

$$n_K = \left\{ 1 + e^{(\epsilon_K - \epsilon_F)/k_B T} \right\}^{-1}, \quad (13.4)$$

которое можно получить, используя обычные соображения статистической механики, если принять допущение о фермievском типе спектра. Вообще говоря, с учетом (13.3) выражение (13.4) является неявным уравнением для функции распределения n_K . Однако оно упрощается при достаточно низких температурах, где ϵ_K можно заменить на ϵ_K^0 .

Следует отметить, что нам не нужно полностью знать ϵ_K^0 и $f(K, K')$, поскольку в физически интересных случаях возмущения таковы, что векторы импульсов лежат только на поверхности Ферми. Для изотропных систем единственной угловой переменной χ является угол между k и k' . Таким образом, опуская для удобства явную зависимость от k_f , запишем две физически важные функции

$$[f(K, K')]_{k=k'=k_f} = f(\chi, \sigma, \sigma') \quad (13.5)$$

и

$$\left[\frac{\partial \epsilon_K^0}{\partial k} \right]_{k=k_f} = v_f = \frac{k_f}{m^*}; \quad (13.6)$$

здесь m^* — эффективная масса, которую мы подробно рассмотрим ниже.

Покажем, каким образом с помощью указанных двух функций можно установить связь между рядом физических величин. Нас будут интересовать главным образом не зависящие от спина свойства [см. (13.8), (13.20) и (13.28)], когда существенна лишь функция (13.5), в которой взят шпур (сумма диагональных элементов) по спиновым переменным.

1. Эффективная масса

Прежде всего следует понять, что в силу условия галилеевской инвариантности величины ϵ^0 и f не вполне независимы. Приведем здесь следующее рассуждение, предложенное Таулессом [194]. Пусть каждая из частиц системы приобрела малый импульс dq . При этом потенциальная энергия не меняется и вклад в приращение полной энергии, равный $N(dq)^2/2m$, даст только кинетическую энергию. Фактически эта операция сводится к жесткому смещению сферы Ферми для квазичастиц, показанному на фиг. 50. Такое смещение равносильно рождению квазичастиц справа и их одновременному уничтожению слева. Тогда можно воспользоваться другим способом подсчета увеличения энергии, а именно подставить в выражение для

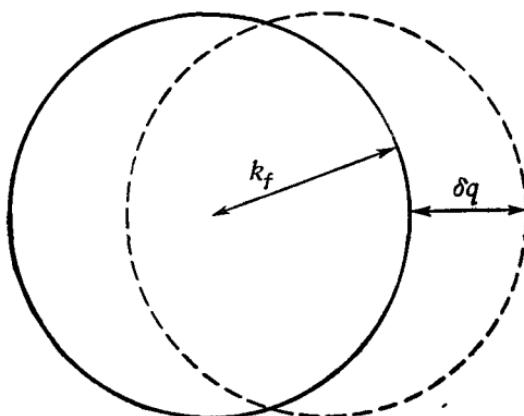
энергии возбужденного состояния (13.2) следующие значения:

$$\delta n_K = \begin{cases} 1 & \text{для } k_f < k < k_f + \delta q \cos \theta, \theta \text{ в квадрантах 1 и 4,} \\ -1 & \text{для } k_f + \delta q \cos \theta < k < k_f, \theta \text{ в квадрантах 2 и 3,} \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (13.7)$$

Сокращая везде на $(\delta q)^2$ и переходя к пределу, находим

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m^*} + \frac{k_f}{2(2\pi^3)} \int_0^\pi \sum_{\sigma, \sigma'} f(\chi, \sigma, \sigma') \cos \chi 2\pi \sin \chi d\chi. \quad (13.8)$$

Первый член в правой части является вкладом независимых квазичастиц, причем m^* появляется из-за того, что в низшем



Фиг. 50.

порядке $\epsilon_K^0 = \epsilon_f^0 + (k_f/m^*)(k - k_f)$ [ср. (13.6)]. Второй член в (13.8) возникает в результате взаимодействий квазичастиц; угол χ , входящий в подынтегральное выражение (13.8), определяется уравнением

$$\cos \chi = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \varphi'), \quad (13.9)$$

где θ и ϕ — углы, определяющие вектор k в полярных координатах.

2. Удельная теплоемкость

Используя выражение (13.4) (с учетом описанного выше упрощения при низких температурах) можно определить низкотемпературную теплоемкость в точности так же, как и для

системы независимых фермионов. Разумеется, вместо массы m в функцию плотности состояний войдет величина m^* , так что получаем

$$C_v = \frac{1}{3} m^* k_f k_B T. \quad (13.10)$$

Соотношение (13.10) дает способ экспериментального определения m^* .

3. Сжимаемость и первый звук

Известная формула для скорости звука c имеет вид

$$c^2 = \frac{1}{m} \frac{dP}{dp}, \quad (13.11)$$

где P — давление, ρ — плотность. Желательно [в особенности имея в виду соотношение (13.3)] связать это выражение с химическим потенциалом $\mu = \epsilon_f$ и его зависимостью от числа квазичастиц. При этом получается следующий результат:

$$\left(\frac{\partial \mu(\rho)}{\partial N} \right)_\Omega = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial \mu}{\partial \rho} = \frac{1}{N\Omega} \left(\frac{\partial (\mu N)}{\partial \rho} \right)_N = \\ = \frac{1}{N\Omega} \left(\frac{\partial (P\Omega)}{\partial \rho} \right)_N = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_N = \frac{m}{N} c^2. \quad (13.12)$$

Пусть объем системы остается фиксированным; увеличим число частиц в ней от N до $N + \delta N$. Тогда μ изменится по двум причинам: во-первых, уровень Ферми, определяемый соотношением

$$k_f = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad \left(n = \frac{N}{\Omega} \right), \quad (13.13)$$

сместится от k_f до $k_f + \delta k_f$; во-вторых, возникнет тонкий сферический слой добавочных состояний квазичастиц, с которыми взаимодействует данная частица, взятая на поверхности Ферми. В первом приближении оба эффекта аддитивны, что более формально можно записать в виде

$$\frac{\partial \mu}{\partial N} = \frac{\partial \epsilon_f}{\partial N} = \frac{\partial \epsilon_f}{\partial k_f} \frac{\partial k_f}{\partial N} + \frac{\partial \epsilon_f}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial N}. \quad (13.14)$$

Производные $\partial k_f / \partial N$ и $\partial n / \partial N$ вычисляются с использованием выражения (13.13); они равны соответственно $k_f / 3N$ и $1/\Omega$. Заметим, что в (13.14) мы должны вычислить $\partial \epsilon_f / \partial k_f$ при постоянном значении числа квазичастиц; подставляя в (13.3) $\delta n_K = 0$ и используя (13.6), находим

$$\frac{\partial \epsilon_f}{\partial k_f} = \frac{\partial \epsilon_f^0}{\partial k_f} = \frac{k_f}{m^*}. \quad (13.15)$$

Рассмотрим теперь производную $\delta\epsilon_f/\delta n$. Вклад в выражение (13.3) дает только квазичастичный член, и малое изменение величины ϵ_f определяется тонким слоем добавочных состояний; это изменение равно

$$\delta\epsilon_f = \sum_{K'(\neq K)} f(\chi, \sigma, \sigma') \delta n_{K'}, \quad (13.16)$$

где

$$\delta n_K = \begin{cases} 1 & \text{при } k_f < k < k_f + \delta k_f, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (13.17)$$

Таким образом, соотношение (13.16) принимает вид

$$\delta\epsilon_f = \frac{1}{(2\pi)^3} k_f^2 \delta k_f \int_0^\pi \sum_{\sigma'} f(\chi, \sigma, \sigma') 2\pi \sin \chi d\chi. \quad (13.18)$$

Используя далее соотношение (13.13), записанное в виде $k_f^2 \delta k_f = \pi^2 \delta n$, и заменяя из соображений симметрии $\sum_{\sigma'}$ на $\frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'}$ (поскольку $\delta\epsilon_f$ не зависит от спина), находим

$$\frac{\delta\epsilon_f}{\delta n} = \frac{\pi^2}{2(2\pi)^3} \int_0^\pi \sum_{\sigma, \sigma'} f(\chi, \sigma, \sigma') 2\pi \sin \chi d\chi. \quad (13.19)$$

Собирая различные слагаемые в (13.14), получаем, что скорость звука c , определяемая соотношением (13.12), имеет вид

$$c^2 = \frac{k_f^2}{3mm^*} + \frac{k_f^3}{6m} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \sum_{\sigma, \sigma'} f(\chi, \sigma, \sigma') 2\pi \sin \chi d\chi. \quad (13.20)$$

4. Нулевой звук

Ландау предсказал существование коллективных возбуждений в жидком He^3 , аналогичных плазменным колебаниям в электронном газе, и ввел для этого типа возбуждений специальный термин „нулевой“ звук. Простой пример такого явления рассмотрен в гл. 8, § 3, п. 7 (см. также гл. 10, § 14, п. 1). Однако в этом примере фурье-компоненты потенциала взаимодействия между частицами конечна в длинноволновом пределе. Таким образом, хотя эта модель, очевидно, применима к реальным физическим системам (как это имеет место, например, для заключительной части вычислений Бракнера типа рассмотренных в гл. 6), она все же не может быть использована для непосредственного получения количественных результатов.

Наоборот, теория коллективных колебаний Ландау не обладает этим недостатком.

Важно проводить четкое различие между нулевым и обычным (первым) звуком, описываемым уравнением (13.12). Как известно, в распространении обычной звуковой волны большую роль играют столкновения. [На основе этих соображений и выводятся формулы типа (13.11).] Звук распространяется тем лучше, чем больше число столкновений в единицу времени. Если τ — среднее время между столкновениями, то должно выполняться условие $\omega\tau \ll 1$, где ω — частота распространяющейся волны. Как будет подробно показано в гл. 10, время жизни квазичастицы с импульсом k пропорционально $(k - k_f)^{-2}$, откуда следует, что $\tau \sim T^{-2}$. Таким образом, при понижении температуры столкновения становятся все более редкими и в конце концов звуковые волны перестают распространяться.

Вместе с тем при низкой температуре флуктуации плотности в хорошем приближении можно считать независимыми, так же как, например, плазмоны в металлах и фононы в твердых телах. При повышении температуры возбуждается все больше коллективных колебаний; они взаимодействуют друг с другом, стремясь разрушить хорошо определенные возбужденные состояния. Таким образом, увеличение числа столкновений в единицу времени может привести к неустойчивому состоянию, так что в этом случае критерий распространения волны состоит в выполнении неравенства $\omega\tau \gg 1$. Заметим, что обычная теория звука в твердых телах (а именно вышеупомянутая фононная теория) имеет больше сходства с непривычным нулевым звуком, нежели знакомая теория первого звука, основанная на классической кинетической теории.

Можно ожидать, что при охлаждении ферми-жидкости должен наступать момент, когда первый звук, который сначала легко наблюдается, перестает распространяться; тогда при более низкой температуре, вообще говоря, должен наблюдаться нулевой звук, распространяющийся с другой скоростью. Недавно [1] этот эффект был обнаружен в жидком He^3 , причем найдено согласие с теорией Ландау.

Для количественного рассмотрения нулевого звука предположим, что величина δn_K , входящая в (13.1), может меняться в пространстве в макроскопическом масштабе. Тогда в каждом малом элементе пространства этим изменением можно пренебречь и считать, что здесь по-прежнему применимо рассмотрение Ландау. Очевидно, такое предположение разумно в случае короткодействующих потенциалов (как, например, в жидком гелии), но в случае электронного газа следует проявлять осторожность (мы не будем останавливаться на этой проблеме, так

как детальная микроскопическая теория электронного газа дана выше). Ниже мы будем явно указывать аргумент \mathbf{r} у величин, изменяющихся в пространстве (отсутствие этого аргумента означает, что данная величина не зависит от координат). Запишем (13.1) в виде

$$n_K(\mathbf{r}) = n_K^0 + \delta n_K(\mathbf{r}), \quad (13.21)$$

а (13.3) соответственно в виде

$$\epsilon_K(\mathbf{r}) = \epsilon_K^0 + \sum_{K' (\neq K)} f(K, K') \delta n_{K'}(\mathbf{r}). \quad (13.22)$$

Подставим теперь эти два выражения в обычное уравнение переноса

$$\frac{\partial n_K(\mathbf{r})}{\partial t} + \frac{\partial n_K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \epsilon_K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial n_K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \frac{\partial \epsilon_K(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = I(n_K(\mathbf{r})), \quad (13.23)$$

где I — обычный интеграл столкновений. Линеаризуя уравнение (13.23) и предполагая, что можно ввести время столкновения τ , получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta n_K(\mathbf{r}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \delta n_K(\mathbf{r}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \epsilon_K^0 - \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} n_K^0 \cdot \sum_{K'} f(K, K') \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \delta n_{K'}(\mathbf{r}) = \\ = \text{const} \frac{\delta n_K(\mathbf{r})}{\tau}. \end{aligned} \quad (13.24)$$

Сейчас нас не интересует детальное определение интеграла столкновений, поскольку им можно пренебречь в пределе $\omega\tau \gg 1$. С помощью подстановки нетрудно непосредственно убедиться, что выражение

$$\delta n_K(\mathbf{r}) = v(\theta, \varphi, \sigma) \frac{\partial n_K^0}{\partial \epsilon_K} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (13.25)$$

является решением уравнения (13.23) в случае $\omega\tau \gg 1$, если выполняется соотношение

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \epsilon_K^0}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{q} - \omega \right) v(\theta, \varphi, \sigma) = \\ = \left(\frac{\partial \epsilon_K^0}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{q} \right) \sum_{K'} f(K, K') \frac{\partial n_{K'}^0}{\partial \epsilon_{K'}} v(\theta', \varphi', \sigma'). \end{aligned} \quad (13.26)$$

Полагая $k = k_f$ и используя низкотемпературное приближение $\partial n_K / \partial \epsilon_K \approx -\delta(\epsilon_K - \epsilon_f)$, можно свести условие (13.26)

к следующему:

$$(s - \cos \theta) v(\theta, \varphi, \sigma) = (2\pi)^{-3} m^* k_f \cos \theta \sum_{\sigma'} \int f(\chi, \sigma, \sigma') \times \\ \times v(\theta', \varphi', \sigma') \sin \theta' d\theta' d\varphi', \quad (13.27)$$

где $s = \omega/qv_f$ — отношение скорости нулевого звука к скорости Ферми, θ и φ задают направление v_f относительно волнового вектора нулевого звука q , а χ определяется соотношением (13.9).

Уравнение для собственных функций (13.27) является основным уравнением, описывающим коллективные колебания. Собственные значения s этого уравнения определяют разрешенные частоты колебаний ω , а собственные функции v , входящие в (13.25), дают информацию о некоторых особенностях процесса распространения. (Этот процесс не совсем обычен, однако мы не будем на нем останавливаться подробнее.)

Проиллюстрируем способ практического применения теории Ландау; разложим функцию, просуммированную по спиновым переменным, в ряд по полиномам Лежандра

$$\frac{m^* k_f}{4\pi^2} \sum_{\sigma, \sigma'} f(\chi, \sigma, \sigma') = \sum_l F_l P_l(\cos \chi). \quad (13.28)$$

Тогда из соотношений (13.20) и (13.8) получаем соответственно

$$F_0 = \frac{3mm^*c^2}{k_f^2} - 1 \quad (13.29)$$

и

$$F_1 = 3 \left(\frac{m^*}{m} - 1 \right). \quad (13.30)$$

Величины k_f , c и m^* можно определить экспериментально [величину m^* , в частности, по результатам измерений теплоемкости, используя (13.10)], и, таким образом, найти численные значения величин F_0 и F_1 . Предполагая (правда, без особых оснований!), что правую часть разложения (13.28) можно заменить двумя первыми членами, нетрудно найти решение уравнения (13.27) (подробнее см. в работе Абрикосова и Халатникова [3]). Это решение показывает, что функция v не зависит от угловой и спиновой переменных φ и σ , а скорость нулевого звука на 10% превосходит скорость первого звука. Уравнение (13.27) имеет при $F_1 > 6$ также и второе решение, на этот раз зависящее от угла φ . Последние экспериментальные данные указывают на то, что значение F_1 близко к шести. Вопрос о том, может ли существовать колебание такого типа, остается открытым.

Используя сделанное выше приближение и вводя разумные предположения относительно интеграла столкновений в (13.23),

Абрикосов и Халатников исследовали ряд физических свойств; их рассмотрение имеет более широкую область применимости, нежели приведенное выше. По-видимому, теория Ландау дает полукалические результаты и, в частности, в целом верно предсказывает температурные зависимости (например, вязкости и теплопроводности).

Завершая изложение этого эмпирического подхода, следует упомянуть, что зависимость функции f от спиновых переменных можно также изучать изложенными выше методами. Например, наложение магнитного поля приводит к различию в населенностиах двух спиновых состояний. На языке теории Ландау это означает, что мы создаем некоторое число квазичастиц с одним направлением спина, уничтожив при этом равное число квазичастиц с другим его направлением. Таким образом [ср. (13.3)], для каждой частицы следует учесть влияние не только внешнего поля, но и указанного эффекта изменения числа квазичастиц. Можно найти также решения уравнения (13.27), зависящие от спиновой переменной σ . (Например, записывая $v \sim \sigma$, мы приходим, как указал Ландау, к формализму, не содержащему зависимости от спина.) Однако, как и в случае нулевого звука, зависящего от ϕ , не ясно, могут ли физически реализоваться такие спиновые волны¹⁾.

Разумеется, мы не рассматривали здесь микроскопическое обоснование теории Ландау. Рассмотрев в гл. 10 функции Грина, мы увидим, что для более полного понимания энергетического спектра E_K^0 лучше всего строить теорию в терминах одночастичных функций Грина (см. обсуждения пропагаторов в гл. 4). Аналогично корреляционную функцию $f(K, K')$ можно изучать с помощью двухчастичных функций Грина (Ландау [119]). Все эти вопросы подробно рассмотрены в книге Нозьера [156], к которой мы и отсылаем читателя.

ЗАДАЧИ

5.1. Используя теорему вириала (9.2), получить явное выражение для $E(r_s)$ в виде интеграла от потенциальной энергии $V(r_s)$. Результат должен совпасть с тем, который получается, если воспользоваться методом „включения“ заряда электрона.

5.2 Париная функция $g(r)$ в случае невзаимодействующего ферми-газа имеет вид

$$g(r) = 1 - \frac{9}{2} \left(\frac{j_1(k_f r)}{k_f r} \right)^2.$$

¹⁾ Спиновые волны такого типа были недавно обнаружены экспериментально [S. Schultz, G. Dunifer, Phys. Rev. Lett., 18, 283 (1967); P. M. Platzmann, P. A. Wolf, Phys. Rev. Lett., 18, 280 (1967)]. Теорию см. в работе. В. П. Силин, ЖЭТФ, 35, 1243 (1958) — Прим. перев.

Показать, что фурье-образ от $(g(r) - 1)$ можно записать в виде $S(k) - 1$, где

$$S(k) = \begin{cases} \frac{3k}{4k_f} - \frac{1}{16} \left(\frac{k}{k_f} \right)^3 & (k < 2k_f), \\ 1 & (k > 2k_f). \end{cases}$$

Используя указанную форму $S(k)$, показать, что асимптотическое поведение $g(r)$ определяется зависимостью $S(k)$ в следующих двух областях:

- а) область малых k , вклад которой пропорционален r^{-4} ,
- б) область „аномалии“ при $k = 2k_f$, вклад которой пропорционален $\cos 2k_f r / r^4$.

Следует обратить внимание на то, что, объединяя вклады „а“ и „б“, получаем правильную асимптотическую зависимость $\{-\left(\frac{9}{2}\right) [\cos k_f r / (k_f r)^2]\}$.

5.3. Дать общий (качественный) анализ характера изменения парной функции при включении взаимодействий

5.4. Предложить эксперимент, позволяющий обнаружить плазменные потери в твердом теле.

Объяснить причину прозрачности щелочных металлов для ультрафонолетового излучения [209].

5.5. Качественно описать изменение диэлектрической проницаемости однородного электронного газа, вычисленной в приближении случайных фаз, в присутствии магнитного поля Найти, в частности, как изменится величина интеграла, взятого по объему вокруг точечного заряда, т. е. $\int V(r) dr$, где $V(r)$ — экранированный потенциал, по сравнению с его значением в нулевом поле

5.6. В приближении случайных фаз рассмотреть энергию взаимодействия двух пробных зарядов e_1 и e_2 , помещенных в Ферми-газ, как функцию расстояния между этими зарядами. Показать, что может произойти существенное нарушение классической электростатики.

Какие физические приложения может иметь этот результат?

5.7. Оценить изменение спиновой восприимчивости Паули по сравнению с ее значением в металлическом Li, обусловленное взаимодействием между электронами. Считать, что электроны проводимости можно представить в виде однородного электронного газа с $r_s = 3,6a_0$. (Согласно эксперименту, спиновая восприимчивость составляет $2,5 \cdot \chi_{cb}^0$, где χ_{cb}^0 — значение восприимчивости для системы свободных электронов.)

5.8. Пусть f в уравнении (13.27) является константой, $f = f_0$. Доказать, что функция $v \sim \cos \theta / (s - \cos \theta)$ представляет собой решение, если

$$\frac{1}{2} s \ln \left| \frac{s+1}{s-1} \right| - 1 = \frac{\pi^2}{m^* k_f f_0}.$$

Используя этот результат и выражение (13.20), показать, что в пределе слабой связи ($f \sim 0, m \sim m^*$) нулевой звук распространяется со скоростью, равной скорости Ферми, и что последняя в $\sqrt{3}$ раз превышает скорость первого звука.

Вернувшись затем к уравнению (13.27), показать, что этот результат, полученный для случая слабого взаимодействия, в действительности не зависит от предположения о постоянстве функции f (детали можно найти в работе Ландау [118]).

Глава 6

ЯДЕРНАЯ МАТЕРИЯ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 4 было получено формальное разложение для энергии основного состояния системы взаимодействующих фермионов; в гл. 5 мы применили это разложение к проблеме электронного газа. Основное достижение теории состояло в получении точного разложения для энергии в случае высокой плотности. Методы, развиваемые в настоящей главе, больше подходят для систем низкой плотности. Действительно, мы увидим, что различные члены ряда теории возмущений, содержащие одинаковую зависимость от плотности, можно просуммировать и получить таким образом полезные результаты для систем с низкой плотностью.

§ 2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЯДЕРНОЙ МАТЕРИИ

Рассмотрим для определенности применение метода теории возмущений к задаче о „ядерной материи“. Для того чтобы ввести понятие „ядерной материи“, заметим прежде всего, что в легких ядрах в наиболее устойчивых конфигурациях число нейтронов, как правило, равно числу протонов. В более тяжелых ядрах число нейтронов превышает число протонов; причина этого, как нетрудно понять, состоит в наличии кулоновского отталкивания между протонами, что препятствует скоплению большого числа протонов в малом объеме. Таким образом, именно кулоновские силы препятствуют устойчивости ядер с произвольно большим массовым числом.

Однако, несмотря на кулоновское отталкивание, протоны (вместе с нейтронами) все же могут образовывать устойчивые ядра. Этот факт свидетельствует о том, что специфические ядерные силы значительно превосходят по величине кулоновские. Для изучения эффектов, к которым приводит наличие ядерных сил, удобно считать кулоновское взаимодействие „выключенным“. Позднее можно будет модифицировать результаты, учтя кулоновские эффекты, которые, как правило, малы. Таким образом, мы приходим к понятию ядерной материи как системы протонов и нейтронов, которые занимают объем Ω и входят в систему в равном числе $N/2$ (причем N велико); взаимодействие в системе осуществляется только специфическими ядерными силами. Как и в гл. 5, мы будем пренебрегать

поверхностными эффектами, переходя к пределу $N \rightarrow \infty$, $\Omega \rightarrow \infty$, при условии, что плотность N/Ω остается конечной.

Можно полагать, что внутренняя область (сердцевина) реально существующих достаточно больших, но конечных ядер до некоторой степени подобна „сгусткам“ идеализированной ядерной материи. Применим к ядерной материи метод теории возмущений, развитый в гл. 4. При этом сразу возникают два вопроса:

а) применима ли теория возмущений?

б) если теория возмущений применима, то дает ли правильный результат формула Голдстоуна?

Если, предвосхищая результаты § 12, ответить на первый вопрос утвердительно, то, прежде чем двигаться дальше, придется заняться вторым вопросом. Дело в том, что теорема о разложении по связным диаграммам доказана нами в гл. 4 для двухчастичного потенциала простого вида, тогда как взаимодействие между нуклонами имеет сложную структуру (см. § 3). Хотя до настоящего времени нельзя с полной уверенностью дать утвердительный ответ на второй вопрос, все же есть указание на применимость формулы Голдстоуна в высших порядках теории возмущений, что мы и будем предполагать в дальнейшем. Это следует, в частности, из работы Кона и Латтинжера [115], которые показали, что формула Голдстоуна справедлива во втором порядке теории возмущений для системы нуклонов с тензорным взаимодействием.

§ 3. ЯДЕРНЫЕ СИЛЫ

Экстраполируя имеющиеся данные для тяжелых ядер, можно оценить значение энергии связи в расчете на нуклон для идеализированной ядерной материи; оно равно примерно 16 Мэв. Если определить, далее, радиус r_0 , приходящийся на один нуклон, соотношением $\Omega = N(4/3\pi r_0^3)$, то окажется, что „экспериментальное“ значение r_0 равно по порядку величины 10^{-13} см. Цель микроскопической теории, по крайней мере на первых порах, состоит в том, чтобы объяснить эти результаты, исходя из имеющейся информации о силах взаимодействия между нуклонами, полученной в экспериментах по рассеянию.

Конечная цель теории состоит, разумеется, в том, чтобы вычислить все свойства ядер, задавшись видом двухчастичных сил. Но если теория не дает правильного результата для энергии связи на одну частицу и равновесной плотности, то с ее помощью нельзя получить удовлетворительные результаты и для других статических свойств. Поэтому мы ограничились в данной книге рассмотрением лишь двух параметров ядерной материи.

1. Единицы измерения

В этой главе мы будем измерять энергию в M_eV , а в качестве единицы длины выберем 1 *ферми* $\equiv 10^{-13}$ см. Удобно положить $\hbar = 1$, завершив таким образом выбор системы единиц. Если пренебречь малым различием в массах протона и нейтрона и обозначить массу нуклона через m , то в наших единицах $1/m = 41,5$.

2. Потенциал взаимодействия между двумя нуклонами

В то время как фундаментальная теория должна предсказывать силы взаимодействия между нуклонами, феноменологический подход должен лишь объяснить все экспериментальные данные с помощью соответствующим образом выбранного двухнуклонного потенциала взаимодействия. Только в том случае, если все попытки подобрать такой потенциал окажутся неудачными, придется рассмотреть и другие возможности, а именно: 1) наличие двухчастичных взаимодействий, которые нельзя описать с помощью потенциала, и (или) 2) наличие многочастичных сил.

Будем исходить из потенциала взаимодействия между нуклонами, выбранного так, чтобы с его помощью можно было описать весь имеющийся экспериментальный материал. Мы не будем подробно обсуждать вопрос о том, как это можно сделать, и отсылаем читателя к прекрасному обзору [153]. Удовлетворительное согласие с экспериментальными данными получается при следующих предположениях:

1) Ядерные силы являются зарядово независимыми, иначе говоря, при прочих равных условиях сила взаимодействия между двумя нейtronами равна силе взаимодействия между двумя протонами, а также между протоном и нейtronом.

2) Потенциал взаимодействия между нуклонами является сильным и короткодействующим; помимо очень сильной отталкивающей сердцевины, он характеризуется наличием значительно более слабой части („хвоста“), соответствующей притяжению.

3) Потенциал зависит от спинового состояния системы двух нуклонов.

4) Потенциал зависит от относительного момента количества движения системы двух нуклонов.

5) В потенциал входят тензорный и, возможно, спин-орбитальный члены.

В силу зарядовой независимости межнуклонных сил можно считать протон и нейtron двумя состояниями одной частицы —

нуклона (здесь есть аналогия со спином). Перечисленным выше требованиям удовлетворяет, в частности, сила, для которой межнуклонный потенциал дает бесконечно большое отталкивание, если расстояние r между нуклонами равно радиусу жесткой сердцевины c (см., например, [73]). Для $r > c$ потенциал обычно выбирается в форме, предложенной Юкавой: $Ve^{-\mu r}/\mu r$. Величина и радиус действия потенциала вне жесткой сердцевины, вообще говоря, различны для разных состояний системы двух нуклонов (триплетно-четного, триплетно-нечетного, синглетно-четного и синглетно-нечетного); кроме того, эти характеристики потенциала неодинаковы у различных компонент потенциала (центральной, тензорной и спин-орбитальной).

Ввиду наличия столь большого числа параметров можно подобрать различные наборы потенциалов, которые более или менее одинаково хорошо описывают экспериментальные данные по рассеянию. С помощью одних лишь данных по двухчастичному рассеянию, по-видимому, в настоящее время невозможно сделать выбор между этими потенциалами.

Предположение о наличии твердой сердцевины в межнуклонном потенциале не является единственным способом, позволяющим получить согласие с экспериментальными данными. Предполагая, что потенциал зависит от скорости и становится отталкивательным при возрастании энергии, можно объяснить данные по рассеянию при высоких энергиях (которые ясно указывают на существование отталкивательной части потенциала).

Излагаемый ниже метод частичного суммирования ряда теории возмущений применим как к „жестким“, так и к „мягким“ потенциалам. Это суммирование имеет решающее значение для потенциалов с жесткой сердцевиной, тогда как для потенциалов с мягкой сердцевиной в зависимости от величины константы связи может оказаться достаточно обычной теории возмущений.

§ 4. НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИЕ НУКЛОНЫ

Как уже говорилось выше, мы рассматриваем нейтрон и протон как два состояния одного и того же фермиона — нуклона. Отсюда следует, что N невзаимодействующих нуклонов, находящихся в объеме Ω , заполняют в импульсном пространстве (k -пространстве) сферу радиусом k_f , причем плотность ρ_0 связана с k_f соотношением

$$\rho_0 = \frac{2k_f^3}{3\pi^2},$$

поскольку состояние с одним и тем же импульсом k могут за-

нимать четыре нуклона — два протона со спинами „вверх“ и „вниз“ и два нейтрона также со спинами „вверх“ и „вниз“.

Энергия невозмущенного основного состояния, приходящаяся на частицу, равна

$$\frac{E_0}{N} = \frac{3}{10} \frac{k_f^2}{m} \sim 25 \text{ Мэв для } r_0 \sim 1 \text{ ферми.}$$

Нормированный одночастичный уровень, характеризуемый импульсом \mathbf{k} , будет обозначаться вектором состояния $|k\rangle$; соответствующая волновая функция имеет вид $(1/\Omega^{1/2}) e^{ik \cdot r}$. Четыре состояния нуклона: протон со спином вверх, протон со спином вниз, нейtron со спином вверх и нейtron со спином вниз будут обозначаться соответственно через $\alpha, \beta, \gamma, \delta$; например, оператор $a_{\alpha k}$ имеет смысл оператора уничтожения протона со спином вверх на уровне $|k\rangle$ и т. д. Если нет необходимости точно указывать состояние нуклона, удобно пользоваться скалярными индексами. Так, a_k есть оператор уничтожения нуклона на уровне $|k\rangle$.

Таким образом, невозмущенное состояние ферми-газа из N невзаимодействующих нуклонов имеет вид

$$|g\rangle = \prod_{\substack{|\mathbf{k}| < k_f \\ \omega = \alpha, \beta, \gamma, \delta}} a_{k\omega}^\dagger |0\rangle, \quad (4.1)$$

где $|0\rangle$ обозначает вакуумное состояние. В дальнейшем мы не будем явно выписывать суммирование по четырем состояниям нуклонов. Заменим вместо этого вектор \mathbf{k} скаляром k , записывая, таким образом,

$$|g\rangle = \prod_{k < k_f} a_k^\dagger |0\rangle. \quad (4.2)$$

Как и в гл. 3, для $k < k_f$ можно ввести операторы b_k . Тогда основное состояние ферми-газа становится вакуумным состоянием для нового типа частиц с операторами рождения a_k^\dagger ($k > k_f$) и b_k^\dagger ($k < k_f$).

Гамильтониан системы имеет тот же вид, что и в гл. 4; следует лишь помнить, что суммирование в нем производится не только по импульсам \mathbf{k} , но и по индексам состояний $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, т. е.

$$H_0 = \sum_k \left(\frac{k^2}{2m} - E_f \right) a_k^\dagger a_k, \quad \text{где } E_f = \frac{k_f^2}{2m}.$$

Можно еще более упростить обозначения, используя для состояний с импульсами внутри ферми-поверхности ($k < k_f$)

индексы h , h' , h'' и т. д., а для состояний с импульсами над ферми-поверхностью ($p > k_f$) — индексы p , p' , p'' и т. д. Тогда вместо (4.2) можно написать

$$|g\rangle = \prod a_h^\dagger |0\rangle. \quad (4.3)$$

§ 5. РЯД ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Рассмотрим теперь систему нуклонов, взаимодействие между которыми включается адиабатически (понятие адиабатического включения взаимодействия разъяснялось в гл. 4). Будем предполагать, что при этом система переходит в возмущенное основное состояние, энергия которого определяется формулой Голдстоуна [см. (4.3.5)]

$$E = E_0 + \langle g | V + V \frac{Q}{E_0 - H_0} V + \dots | g \rangle_{\text{св.}} \quad (5.1)$$

Полный гамильтониан с учетом введенного нами двухчастичного взаимодействия имеет вид

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_1 k_2 | v | k_3 k_4 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_3} a_{k_4}. \quad (5.2)$$

Напомним, что суммирование по k подразумевает также суммирование по различным состояниям нуклонов. Отметим также,



Фиг. 51.

что матричные элементы $\langle k_1 k_2 | v | k_3 k_4 \rangle$ имеют пока лишь формальный смысл. Поскольку предполагаемое взаимодействие между нуклонами может содержать твердую сердцевину, указанные матричные элементы могут стать бесконечно большими; рассмотрение этого вопроса мы отложим до § 8.

Входящий в (5.1) член первого порядка по V приводит к двум диаграммам — прямой и обменной, которые изображены соответственно на фиг. 51, а и б. Применяя правила, подробно обсуждавшиеся в гл. 4, получаем следующие выражения для вклада в сдвиг энергии $\Delta E \equiv E - E_0$:

а) Прямой вклад

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum \langle hh' | v | hh' \rangle. \quad (5.3)$$

б) Обменный вклад

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \sum \langle hh' | v | h'h \rangle. \quad (5.4)$$

Члену второго порядка в (5.1) соответствуют две диаграммы, изображенные на фиг. 52, *a* и *б*; их вклады равны соответственно

а) прямой вклад

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum \frac{\langle hh' | v | pp' \rangle \langle pp' | v | hh' \rangle}{d}, \quad (5.5)$$

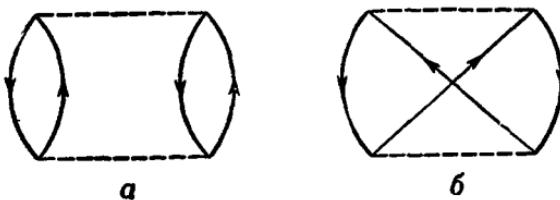
б) обменный вклад

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \sum \frac{\langle hh' | v | pp' \rangle \langle pp' | v | h'h \rangle}{d}. \quad (5.6)$$

Знаменатель *d* в (5.5) и (5.6) имеет вид

$$\frac{1}{d} = -\frac{1}{(p^2 + p'^2)/2m - (h^2 + h'^2)/2m}.$$

Все члены (5.3) – (5.6) пропорциональны $N\rho$ (см. гл. 4). В гл. 4 было показано также, что в каждом порядке по возмущению *V*

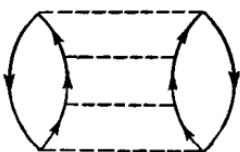


Фиг. 52.

в ряд Голдстоуна входят члены, пропорциональные $N\rho$ (они соответствуют диаграммам, содержащим только две независимые дырочные линии). Начиная с третьего порядка, в этом ряду появляются члены, пропорциональные $N\rho^2$ и, соответствующие трем независимым дырочным линиям. В *n*-м порядке появляются члены, пропорциональные $N\rho, N\rho^2, \dots, N\rho^{n-1}$.

В системе многих частиц двухчастичное взаимодействие может и не быть слабым, поэтому нельзя ожидать, что несколько первых членов теории возмущений дадут достаточно точные результаты. Однако в случае малой плотности частиц можно получить полезные результаты, если во всех порядках ряда теории возмущений учесть члены, линейные по плотности (пропорциональные $N\rho$), и преиебречь всеми членами, пропорциональными $N\rho^r$ с $r \geq 2$. Ядерная материя не относится к числу

таких систем, поскольку радиус взаимодействия между нуклонами не мал по сравнению с расстоянием между частицами. Однако по-настоящему сильная часть взаимодействия между нуклонами является короткодействующей, и можно надеяться, что приближение низкой плотности в этом случае применимо. Таким образом, следует ожидать, что при рассмотрении ядерной материи наиболее существенны члены, содержащие зависимость от плотности вида $N\rho$. В любом порядке по V ряда теории возмущений имеется как раз один прямой член, содержащий множитель $N\rho$ и, таким образом, пропорциональный



Фиг. 53

плотности (обменные диаграммы, которые можно получить из рассматриваемой прямой диаграммы, также дают вклад, пропорциональный $N\rho$). Например, диаграмма на фиг. 53 соответствует прямому члену четвертого порядка, дающему в ΔE вклад, пропорциональный $N\rho$. Такие диаграммы (и соответствующие им члены) называют лестничными; они отличаются тем, что содержат только две линии дырок и различное число линий частиц.

В § 6 мы увидим, каким образом можно просуммировать вклады лестничных диаграмм с помощью матрицы реакции, или " t -матрицы". Несмотря на то что отдельные вклады пропорциональны $N\rho$, сумма от бесконечного числа членов не всегда дает ту же зависимость от плотности (достаточно вспомнить, например, логарифмическую сингулярность, полученную в теории электронного газа высокой плотности в гл. 5). Однако мы будем все же исходить из того, что указанная пропорциональность имеет место.

§ 6. ВВЕДЕНИЕ t -МАТРИЦЫ

Определим t -матрицу следующим (символическим) интегральным уравнением:

$$t = v + v \frac{Q}{d} t, \quad (6.1)$$

где v обозначает межнуклонный потенциал, а Q/d — ядро интегрального уравнения (оно будет тоже определено в дальней-

шем). Можно считать, что введенная указанным образом t -матрица описывает эффективное взаимодействие между двумя нуклонами в ядерной материи. Решая уравнение (6.1) методом итерации, получаем следующий бесконечный ряд для t -матрицы:

$$t = v + v \frac{Q}{d} v + v \frac{Q}{d} v \frac{Q}{d} v + \dots \quad (6.2)$$

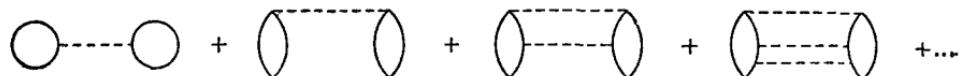
Возьмем матричные элементы уравнения (6.1):

$$\langle hh' | t(\epsilon) | hh' \rangle = \langle hh' | v | hh' \rangle + \sum_{pp'} \frac{\langle hh' | v | pp' \rangle \langle pp' | t(\epsilon) | hh' \rangle}{\epsilon - (p^2 + p'^2)/2m}; \quad (6.3)$$

здесь h, h' — занятые одночастичные уровни. В соответствии с (6.3) ядро Q/d определяется следующим образом:

$$\frac{\sum_{pp'} | pp' \rangle \langle pp' |}{\epsilon - (p^2 + p'^2)/2m}. \quad (6.4)$$

Обычно d считают просто энергетическим знаменателем, равным разности между величиной ϵ и суммой кинетических энергий промежуточных состояний. Как видно из (6.4), ядро Q



Фиг. 54

обеспечивает выполнение принципа Паули, поскольку суммирование по промежуточным состояниям производится по не занятым уровням, лежащим выше уровня Ферми.

Нетрудно понять, какой смысл имеет t -матрица (являющаяся функцией ϵ). Если выбрать, например, $\epsilon = (h^2 + h'^2)/2m$, то уравнение (6.3) просто суммирует вклады бесконечной подпоследовательности, состоящей из всех прямых лестничных диаграмм ряда теории возмущений. Таким образом, в пределе низкой плотности, когда учитываются только лестничные диаграммы (включая обменные), находим

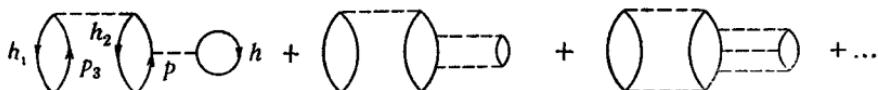
$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum \left[\langle hh' | t \left(\frac{h^2 + h'^2}{2m} \right) | hh' \rangle - \langle hh' | t \left(\frac{h^2 + h'^2}{2m} \right) | h'h \rangle \right]. \quad (6.5)$$

Такой специальный выбор ϵ позволил нам просуммировать прямые лестничные диаграммы, изображенные на фиг. 54; при другом выборе величины ϵ мы смогли бы просуммировать другие подпоследовательности диаграмм. Например, чтобы

„просуммировать“ бесконечную подпоследовательность, изображенную на фиг. 55, следует выбрать ϵ в виде

$$\epsilon = \frac{h_1^2 + h_2^2 + h^2 - p_3^2}{2m}.$$

В этом можно убедиться, вспоминая правила записи матричных элементов, в соответствии с которыми уравнение для



Фиг. 55.

t -матрицы в данном случае будет иметь вид

$$\langle ph | t | ph \rangle = \langle ph | v | ph \rangle + \sum_{p'p''} \frac{\langle ph | v | p'p'' \rangle \langle p'p'' | t | ph \rangle}{(h_1^2 + h_2^2 + h^2)/2m - (p_3^2 + p'^2 + p''^2)/2m}. \quad (6.6)$$

§ 7. ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ t -МАТРИЦЫ

Рассмотрим бесконечную ядерную среду с плотностью порядка той, которая характерна для центров конечных ядер. В этом случае вследствие наличия сильного межнуклонного взаимодействия два сблизившихся нуклона, прежде чем разойтись, взаимодействуют несколько раз. Как мы видели, указанный факт можно учесть с помощью одного эффективного t -взаимодействия, так что выражение для ΔE в первом порядке по t , по-видимому, может быть хорошим приближением для системы низкой плотности. Опишем здесь процедуру вычисления матричных элементов t -матрицы.

Рассмотрение спиновых состояний производится тривиально. Для каждого отдельного спинового состояния имеется отдельное уравнение для t -матрицы, в которое входит соответствующая часть межнуклонного потенциала. Чтобы не усложнять обозначений, не будем указывать явно спиновые состояния. Для вычисления матричного элемента $\langle k_1 k_2 | t | k_1 k_2 \rangle$ удобно ввести полный и относительный импульс системы двух частиц следующим образом:

$$2P = k_1 + k_2, \quad (7.1)$$

$$k = \frac{1}{2} (k_1 - k_2). \quad (7.2)$$

Поскольку при взаимодействии полный импульс сохраняется, типичное уравнение для t -матрицы принимает вид

$$\langle \mathbf{k}' | t(\mathbf{P}) | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | v | \mathbf{k} \rangle + \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\langle \mathbf{k}' | v | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | t(\mathbf{P}) | \mathbf{k} \rangle f(\mathbf{P}, \mathbf{k}'')}{\epsilon - (1/2m) |\mathbf{P} + \mathbf{k}''|^2 - (1/2m) |\mathbf{P} - \mathbf{k}''|^2}, \quad (7.3)$$

где \mathbf{k} , \mathbf{k}'' и \mathbf{k}' — относительные импульсы двух частиц соответственно в начальном, промежуточном и конечном состояниях, ϵ обозначает начальную кинетическую энергию нуклонов, т. е.

$$\frac{|\mathbf{P} + \mathbf{k}|^2 + |\mathbf{P} - \mathbf{k}|^2}{2m},$$

а введенный в (7.3) матричный элемент $\langle \mathbf{k}' | t(\mathbf{P}) | \mathbf{k} \rangle$ означает не что иное, как

$$\langle \mathbf{P} + \mathbf{k}', \mathbf{P} - \mathbf{k}' | t | \mathbf{P} + \mathbf{k}, \mathbf{P} - \mathbf{k} \rangle.$$

Наконец, определим функцию f в (7.3) следующим образом:

$$f(\mathbf{k}'', \mathbf{P}) = \begin{cases} 1, & \text{если } |\mathbf{P} \pm \mathbf{k}''| > k_f, \\ 0 & \text{в остальных случаях;} \end{cases}$$

наличие множителя f обеспечивает выполнение принципа Паули при суммировании.

Интегральное уравнение (7.3) решается непосредственно с помощью введения „волновой“ матрицы M , определяемой уравнением

$$t = vM = v + v \frac{Q}{d} vM, \quad (7.4)$$

из которого непосредственно следует, что

$$M = 1 + \frac{Q}{d} vM. \quad (7.5)$$

Записывая (7.5) полностью через матричные элементы, получаем

$$\langle \mathbf{r} | M | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | M | \mathbf{k} \rangle d\mathbf{r}', \quad (7.6)$$

где

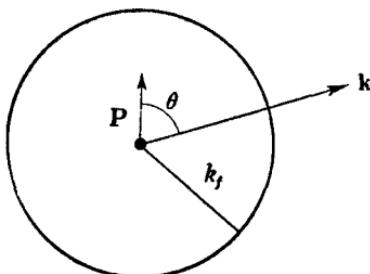
$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \mathbf{P}) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{\epsilon - \frac{P^2}{m} - \frac{k^2}{m}}. \quad (7.7)$$

Удобно ввести обозначение $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ для $\langle \mathbf{r} | M | \mathbf{k} \rangle$; эта величина, так же как и $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, зависит от начальной энергии ϵ и, кроме того, от полного импульса $2\mathbf{P}$ (мы не указываем этой

зависимости явно во избежание дальнейшего усложнения обозначений). Полученное в результате интегральное уравнение

$$\psi_k(r) = e^{ik \cdot r} + \int G(r, r') v(r') \psi_k(r') dr' \quad (7.8)$$

отличается от обычного уравнения для рассеяния (см. гл. 1, задача 1.1) наличием в ядре G функции f , что препятствует обращению в нуль энергетического знаменателя. „Рассеянная волна“ также убывает на больших расстояниях быстрее, чем r^{-1} , а само ядро G анизотропно. Уравнение (7.8) известно под названием уравнения Бете — Голдстоуна.



Фиг. 56.

Решение этого уравнения можно найти обычным образом с помощью разложения по парциальным волнам; при этом, вообще говоря, мы получим систему связанных уравнений. Мы не будем выписывать их здесь явно и отсылаем читателя к работе [202]. Рассмотрим, однако, упрощение, сделанное Бракнером и Гаммелем [35], которые усреднили функцию f по всем направлениям полного импульса $2P$, разорвав тем самым связь между уравнениями.

Если θ — угол между направлениями P и k , то функция f равна единице при условии

$$\cos \theta < \frac{(P^2 + k^2 - k_f^2)}{kP};$$

в противном случае $f = 0$ (фиг. 56). Усредняя по всем углам θ , находим

$$\bar{f}(P, k) = \begin{cases} 0, & \text{если } P^2 + k^2 < k_f^2, \\ 1, & \text{если } |P - k| > k_f, \\ \frac{P^2 + k^2 - k_f^2}{kP} & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases}$$

После выполнения указанной процедуры усреднения связь все же сохраняется за счет тензорных сил в триплетных со-

стояниях. При этом получаем связанные интегральные уравнения для триплетных состояний и отдельные интегральные уравнения для синглетных состояний. Как будет показано ниже (см. § 8), все трудности при решении этих интегральных уравнений заключаются в способе учета жесткой сердцевины в межнуклонном потенциале. Если указанные уравнения решены, элементы t -матрицы записываются в виде

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | t | \mathbf{k} \rangle &= \langle \mathbf{k} | v M | \mathbf{k} \rangle = \\ &= \sum_{\mathbf{r}' \mathbf{r}} \langle \mathbf{k} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | v | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | M | \mathbf{k} \rangle \equiv \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} v(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (7.9) \end{aligned}$$

и, следовательно, можно найти выражение для ΔE , воспользовавшись соотношением (6.5).

§ 8. УЧЕТ ЖЕСТКОЙ СЕРДЦЕВИНЫ

Рассмотрим метод решения интегральных уравнений типа (7.8) на примере s -волновой части этого уравнения. Мы не будем выписывать полную систему уравнений, поскольку метод остается тем же и для компонент с большими значениями момента количества движения, а также для связанных уравнений.

Пусть функция $\phi(r)/r$ является s -волновой частью $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, а

$$\frac{\phi_0(r)}{r} = \frac{\sin kr}{kr}$$

является s -волновой частью плоской волны $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$.

Тогда s -волновая часть уравнения (7.8) принимает вид

$$\phi(r) = \phi_0(r) + \int_0^\infty dr' G_0(r, r') v(r') \phi(r'), \quad (8.1)$$

где

$$G_0(r, r') = \frac{2}{\pi} \int dk \frac{\bar{f}(k, P) \sin kr \sin kr'}{\epsilon - P^2/m - k^2/m}. \quad (8.2)$$

Если $r = c$ — радиус жесткой сердцевины в потенциале, то

$$\phi(r) = 0 \quad \text{при} \quad r = c.$$

Пусть вклад функции $v\phi$ при $r = c$ носит характер δ -функции, т. е.

$$v\phi = \lambda \delta(r - c). \quad (8.3)$$

Тогда уравнение (8.1) можно представить в следующем виде:

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \lambda G_0(r, c) + \int_c^\infty dr' G_0(r, r') v(r') \varphi(r'), \quad (8.4)$$

где

$$0 = \varphi(c) = \varphi_0(c) + \lambda G_0(c, c) + \int_c^\infty dr' G(c, r') v(r') \varphi(r'); \quad (8.5)$$

последнее условие определяет параметр λ . Таким образом,

$$\begin{aligned} \varphi(r) = & \left\{ \varphi_0(r) - \varphi_0(c) \frac{G_0(r, c)}{G_0(c, c)} \right\} + \\ & + \int_0^\infty dr' \left\{ G_0(r, r') - \frac{G_0(r, c) G_0(c, r')}{G_0(c, c)} \right\} v(r') \varphi(r'). \end{aligned} \quad (8.6)$$

Указанная процедура преобразования неоднородного члена и функции Грина интегрального уравнения устраниет трудности, связанные с появлением бесконечностей вследствие наличия потенциала жесткой сердцевины, и мы получаем интегральные уравнения, решения которых легко найти. С помощью этих решений можно получить элементы t -матрицы:

$$\begin{aligned} \langle k | t | k \rangle = & \int_0^\infty \varphi_0 v \varphi dr = \varphi_0(c) \lambda + \int_c^\infty dr \varphi_0(r) v(r) \varphi(r) = \\ = & - \frac{\varphi_0^2(c)}{G(c, c)} + \int_c^\infty dr \left\{ \varphi_0(r) - \varphi_0(c) \frac{G(c, r)}{G(c, c)} \right\} v(r) \varphi(r). \end{aligned} \quad (8.7)$$

Здесь мы неявно предполагали, что $\varphi v = 0$ при $r < c$. Этот результат является лишь полезным приближением, что выяснится в конце вычислений.

Применив эту простую теорию, Бракнер и Гаммель получили для энергии связи на нуклон в ядерной материи значение порядка 35 Мэв! Отсюда можно сделать вывод, что ядерную материю нельзя рассматривать просто как систему низкой плотности. Важные вклады дают также другие члены ряда теории возмущений. Поэтому Бракнер и Гаммель усовершенствовали свою теорию с учетом дополнительных членов, по-видимому, важных с физической точки зрения; ниже мы рассмотрим этот вариант теории.

§ 9. ПРОПАГАТОРНЫЙ ФОРМАЛИЗМ

Сейчас мы уже хорошо знакомы с применением модели независимых частиц, или метода Хартри — Фока в качестве первого приближения в проблеме многих частиц. Как мы видели, основная идея этого метода состоит в том, чтобы рассматривать движение одной частицы в среднем поле, создаваемом движением других частиц. Полную энергию и другие свойства можно выразить тогда через одночастичные энергии и полученные таким образом волновые функции. Эта модель применима в тех случаях, когда силы взаимодействия между частицами не настолько сильны, чтобы привести к локальным корреляциям и конденсации частиц. Для систем с сильными двухчастичными силами следует вычислять двухчастичные взаимодействия более точно; для этого используют модель независимой пары частиц.

В этой модели делается попытка рассмотреть движение пары частиц в среднем поле, созданном остальными частицами системы. Затем энергию и другие свойства выражают через энергию взаимодействия пары частиц, парные волновые функции и т. д. Для успешного применения метода корреляции трех и большего числа частиц должны быть малы. Поскольку в ядерной материи расстояния между частицами и радиус взаимодействия между нуклонами при равновесной плотности являются величинами одного порядка, разумно предположить, что существенную роль играют лишь двухчастичные корреляции, тогда как корреляции большего числа частиц, по-видимому, не важны.

Поэтому модель независимых пар может хорошо описывать ядерную материю. Уже результат (6.5) можно рассматривать как первую попытку построения модели независимых пар. В § 6 мы рассматривали движение (рассеяние) пары нуклонов в ядерной материи. При этом наличие других нуклонов учитывалось лишь пассивным образом: мы ограничились тем, что считали запрещенным рассеяние рассматриваемых нуклонов в состояния, уже занятые другими нуклонами. Однако можно просто учесть взаимодействие других нуклонов с рассматриваемой парой, изменив энергетический знаменатель в (6.1). В качестве примера рассмотрим диаграммы третьего порядка, изображенные на фиг. 57. Согласно правилам гл. 4, их вклад равен

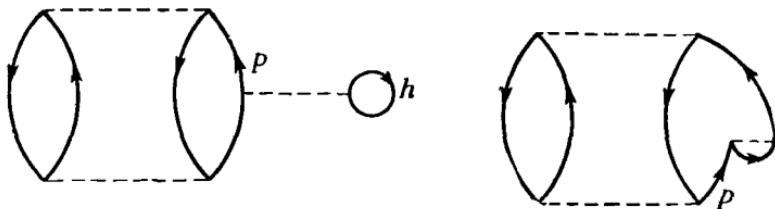
$$\frac{1}{2} \sum \frac{\langle h_1 h_2 | v | pp' \rangle \langle pp' | v | h_1 h_2 \rangle}{[(h_1^2 + h_2^2 - p^2 - p'^2)^2]/4m^2} V(p),$$

где

$$V(k) = \sum_h [\langle kh | v | kh \rangle - \langle kh | v | hk \rangle]; \quad (9.1)$$

потенциал $V(k)$ напоминает эффективный одночастичный потенциал теории Хартри – Фока.

Если рассмотреть диаграмму второго порядка на фиг. 58, из которой диаграмма на фиг. 57 получается путем введения



Фиг. 57.

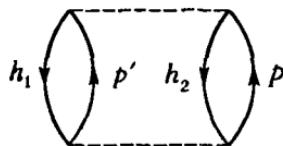
„собственно-энергетических вставок“ (см. гл. 10) в линию с индексом p , и использовать для энергетического знаменателя выражение

$$\frac{k^2}{2m} + V(k) = \epsilon(k), \quad (9.2)$$

а не просто кинетическую энергию $k^2/2m$, то, оставляя другие правила без изменения, получаем

$$\frac{1}{2} \sum \frac{\langle h_1 h_2 | v | pp' \rangle \langle pp' | v | h_1 h_2 \rangle}{\left[\frac{h_1^2 + h_2^2}{2m} + V(h_1) + V(h_2) - \frac{p^2 + p'^2}{2m} - V(p) - V(p') \right]}. \quad (9.3)$$

Разлагая знаменатель и оставляя лишь члены, линейные по V , можно видеть, что при новой интерпретации диаграмма вто-



Фиг. 58.

рого порядка, изображенная на фиг. 58, автоматически учитывает не только вклады диаграмм на фиг. 57 и 58, но также вклады и тех трех диаграмм, которые получаются из фиг. 58 путем введения „собственно-энергетических вставок“ в три сплошные линии с индексами h_1 , h_2 и p' . С физической точки зрения мы сделали шаг вперед по сравнению с моделью независимых пар и получили возможность (хотя, быть может, и не вполне совершенную) учитывать ядерную связь между двумя частицами при их распространении и рассеянии в среде.

§ 10. УРАВНЕНИЯ БРАКНЕРА — ГАММЕЛЯ

Бракнер и Гаммель применили пропагаторный формализм (см. § 9) и, кроме того, вместо взаимодействия v использовали t -матрицу, что приводит, как показано ниже, к условию самосогласованности.

В дальнейшем удобно различать t -матрицы, вычисленные с использованием ренормированных энергетических знаменателей (мы будем называть их K -матрицами), от тех, где используется просто кинетическая энергия.

Возвращаясь к условию самосогласованности, заметим сначала, что в соответствии с определением (9.2) эффективный одночастичный потенциал $V(k)$ в выражении для энергии следует вычислять с помощью модифицированного соотношения (9.1), в котором взаимодействие v заменено K -матрицей:

$$V(k) = \sum [\langle kh | K | kh \rangle - \langle kh | K | hk \rangle]. \quad (10.1)$$

Очевидно, соотношение (10.1) является новым условием самосогласованности, поскольку для вычисления $V(k)$ требуется знать $\epsilon(k)$ и наоборот.

Фактически для проведения самосогласованных вычислений необходимы дальнейшие аппроксимации, и получающиеся уравнения не столь просты, как можно было бы ожидать по виду соотношения (10.1). Чтобы убедиться в этом, запишем уравнение для K -матрицы в явной форме:

$$K(\epsilon) = v + v \frac{Q}{d} K(\epsilon), \quad (10.2)$$

где

$$\frac{Q}{d} \equiv \sum \frac{|\langle pp' \rangle \langle pp' |}{\epsilon - \epsilon(p) - \epsilon(p')} \quad (10.3)$$

(зависимость K от ϵ указана явно). Таким образом, для вычисления $\langle h_1 h_2 | K | h_1 h_2 \rangle$ мы выбираем

$$\epsilon = \epsilon(h_1) + \epsilon(h_2),$$

где $\epsilon(h_1)$ и $\epsilon(h_2)$ определяются соотношениями (9.2) и (10.1). Теперь задачу как будто бы можно считать решенной, поскольку K в уравнении (10.1) зависит от параметра $\epsilon(k) + \epsilon(h)$, однако трудность состоит в том, что для решения уравнения (10.2) также нужно знать величину $\epsilon(p)$.

Чтобы уяснить природу этой трудности, заметим прежде всего, что мы интерпретировали величину $\epsilon(k)$ как эффективную одночастичную энергию и рассматривали при этом $V(k)$ как средний потенциал, действующий на одну частицу и возникающий в результате взаимодействия ее с остальными частицами.

Это, по-видимому, позволяет однозначным образом вычислить $V(k)$ при $k < k_f$. Однако при $k > k_f$ вычисление $V(k)$ становится неоднозначным, поскольку для нахождения $V(p)$ необходимо знать $\langle ph | K | ph \rangle$. Вид энергетического знаменателя (в полной аналогии с § 6) зависит от точного положения на диаграмме линии с индексом p , т. е. от предыстории частицы, занявшей свободный ранее уровень p .

Бракнер и Гаммель аппроксимировали энергетический знаменатель так, чтобы величина $\epsilon(p)$ зависела только от некоторого среднего значения $\epsilon - \Delta$ (мы обсудим его ниже) и индекса p . Полученные ими приближенные самосогласованные уравнения сводятся к следующей системе:

$$\epsilon(h) = \frac{h^2}{2m} + V(h), \quad (10.4)$$

где

$$V(h) = \sum [\langle hh' | K(\epsilon(h) + \epsilon(h')) | hh' \rangle - \langle hh' | K(\epsilon(h) + \epsilon(h')) | h'h \rangle], \quad (10.5)$$

$$K(\epsilon) = v + v \frac{Q}{d} K(\epsilon), \quad (10.6)$$

$$\frac{Q}{d} = \sum_{pp'} \frac{|\langle pp' \rangle \langle pp' |}{\epsilon - \epsilon(p, \epsilon) - \epsilon(p', \epsilon)} \quad (10.7)$$

и

$$\epsilon(p, \epsilon) = \frac{p^2}{2m} + \sum_h [\langle ph | K(\epsilon - \Delta) | ph \rangle - \langle ph | K(\epsilon - \Delta) | hp \rangle]; \quad (10.8)$$

напомним, что Δ представляет собой среднюю энергию возбуждения частицы.

Тогда сдвиг энергии ΔE в первом порядке по K -матрице описывается соотношением

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_{hh'} \{ \langle hh' | K(\epsilon(h) + \epsilon(h')) | hh' \rangle - \langle hh' | K(\epsilon(h) + \epsilon(h')) | h'h \rangle \}, \quad (10.9)$$

которое аналогично соотношению (6.5) в простой теории t -матрицы.

§ 11. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЯДЕРНОЙ МАТЕРИИ

1. Методы

При решении уравнения для K -матрицы мы следуем в основном методам, которые были использованы при решении уравнений для t -матрицы в § 7. Поэтому мы не будем здесь входить в детали; опишем только процедуру самосогласования.

Начнем решение уравнения для K -матрицы с того, что заменим $\epsilon(h)$ и $\epsilon(p, \epsilon)$ кинетическими энергиями, а именно

$$\epsilon(h) = \frac{h^2}{2m} \text{ и } \epsilon(p, \epsilon) = \frac{p^2}{2m}.$$

С помощью полученных таким образом матричных элементов K -матрицы вычисляются новые значения $\epsilon(h)$ и $\epsilon(p)$; в свою очередь, эти значения вновь используются для нахождения K -матриц. Указанный процесс повторяется до тех пор, пока не будет достигнута приближенная самосогласованность; из-за наличия энергетических знаменателей в ходе итерационной процедуры возникает новая связь между парциальными волнами (в дополнение к связи, обусловленной принципом Паули). Эту связь можно исключить, совершив усреднение по углам, как это было сделано в § 7.

Описанный выше метод вычисления параметров ядерной материи, с одной стороны, весьма сложен из-за условия самосогласованности, с другой стороны, он может вызвать некоторые возражения, связанные с тем, что величина $\epsilon(k)$ при $k > k_f$ вычислялась в известной мере произвольно. Бракнер и Гаммель указали формальный путь преодоления этой трудности, однако их общий метод до сих пор не нашел практического применения. Были сделаны две попытки упростить вычисления параметров ядерной материи, которые кратко рассмотрены ниже.

Мошковский и Скотт [154] разделили межнуклонный потенциал на короткодействующую и дальнодействующую части

$$v = v_s + v_l.$$

Рассмотрение короткодействующей части v_s , приводит к трудностям, связанным с жесткой сердцевиной. Однако в силу малости радиуса действия этого потенциала соответствующую t -матрицу (например, t_s) можно вычислить в первом приближении, как если бы нуклоны взаимодействовали не в ядерной среде, а в свободном пространстве. Назовем это приближение t_s^F . Поскольку при вычислении v_l не возникает никаких трудностей, связанных с жесткой сердцевиной, можно применять к этому слагаемому обычную теорию возмущений. Тогда разность между t_s^N (t -матрицей для взаимодействия v_s в ядерной материи) и t_s^F можно вычислить, выразив ее через энергию нуклонов в ядерной материи $\epsilon(k)$.

Бете и др. [18] развили метод, не предполагающий разделения потенциала на короткодействующую и дальнодействующую части; по мнению авторов [18], этот метод по точности

превосходит метод, использованный Мошковским и Скоттом [154]. Бете и др. [18] также подчеркивают, что $V(p)$ не имеет ничего общего с действительной потенциальной энергией, которой обладает нуклон с импульсом p при своем движении в ядерной материи.

Величины $V(k)$ вводятся единственно с целью получения определенных значений для членов в энергетических знаменателях в уравнениях для K -матрицы. Поэтому Бете и др. [18] развили метод „модельного спектра“, позволяющий использовать для энергетических знаменателей более простые выражения, чем самосогласованные величины, которые применялись Бракнером и Гаммелем. Не углубляясь далее в детали этих методов, перейдем к формулировке результатов недавно выполненных вычислений основных ядерных параметров.

2. Результаты

Наиболее ранние вычисления параметров ядерной материи с реалистическим двухчастичным потенциалом, превосходящие по точности обычную теорию возмущений, были сделаны Бракнером и Гаммелем [35]. С помощью лучших известных в то время двухчастичных взаимодействий они получили значения 15–18 Мэв для энергии связи ядерной материи в расчете на нуклон; эти значения находятся в разумном соответствии с эмпирическим значением 16 Мэв. Впоследствии были предложены два новых межнуклонных потенциала.

Бракнер и Мастерсон [37] использовали несколько более грубый вариант теории Бракнера – Гаммеля с потенциалом, предложенным Лассила и др. [123], тогда как Разави [170] использовал потенциал, предложенный Хамада и Джонстоном [92] в методе модельного спектра (без условия самосогласованности). Как те, так и другие вычисления дали значения порядка 8 Мэв для энергии связи ядерной материи (в расчете на нуклон) при значении плотности, соответствующем $r_0 \sim 1,3$ ферми. Такое значение нельзя считать удовлетворительным. Действительно, теория ядерной материи как системы многих частиц, по-видимому, развита достаточно хорошо, чтобы можно было ожидать лучшего согласия с экспериментом. В § 12 мы рассмотрим возможные способы преодоления указанной трудности.

§ 12. ЯДЕРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И КОРРЕЛЯЦИИ

В развитой выше теории ядерной материи описание объемных свойств основывается на заданном виде потенциала взаимодействия между двумя нуклонами. Возможно, однако, что ядерные силы нельзя получить с помощью потенциала; возможно также,

что существенную роль играют силы взаимодействия между тремя или более частицами. Прежде чем делать столь далеко идущие выводы, попытаемся изучить другие возможные пути согласования вычисленного значения энергии связи (8 Мэв в расчете на частицу) с экспериментальным значением.

1. Потенциал „с мягкой сердцевиной“

Высказывалось предположение о том, что короткодействующее отталкивание между нуклонами не следует описывать с помощью потенциала с жесткой сердцевиной. Вонг [206] рассматривал потенциал с „мягким“ отталкиванием типа Юкавы, соответствующим обмену очень тяжелыми мезонами с комптоновской длиной волны порядка $0,2 \text{ ферми}$. В момент написания данной книги не существовало никакого реалистического „мягкого“ потенциала, который одновременно удовлетворял бы данным по двухнуклонному рассеянию и давал разумное значение для ядерной энергии связи. Однако результаты работы Вонга [206] позволяют надеяться, что можно найти подходящий вид „мягкого“ потенциала. По-видимому, возможны и другие способы изменения вида взаимодействия между двумя нуклонами, которые приводили бы к удовлетворительным значениям ядерной энергии связи, не нарушая при этом соответствия с данными по двухнуклонному рассеянию. Одним из таких способов может быть, например, введение потенциала, зависящего от скорости.

2. Сингулярность K -матрицы и двухчастичные корреляции

До сих пор мы не останавливались на вопросе о том, могут ли уравнения для K -матрицы обладать сингулярными решениями. Исходя из ситуации, имеющей место в других многочастичных проблемах, можно предположить, что при наличии у двухчастичной силы дополнительного члена, соответствующего притяжению, могут возникнуть связанные парные состояния; такие состояния приводят, как известно, к появлению щели в одночастичном энергетическом спектре (см. гл. 7). Бор и др. [28] обнаружили эмпирически, что первое внутреннее возбужденное состояние тяжелых деформированных четно-четных ядер лежит примерно на 1 Мэв выше основного состояния, тогда как ожидаемое расстояние между однонуклонными возбужденными состояниями имеет порядок $0,25 \text{ Мэв}$. Это дает основание поставить вопрос о том, не является ли ядерная материя сверхтекучей жидкостью (ср. гл. 7 и 8), у которой свойства основного состояния нельзя изучать с помощью теории возмущений.

Двухчастичные притягивающие потенциалы приводят к сингулярности в уравнении для K -матрицы; это лучше всего иллюстрируется на примере факторизующегося потенциала [14]. Матричный элемент потенциала, взятый по двум состояниям, в которых относительный импульс двух нуклонов равен соответственно $2k$ и $2k'$, по предположению, имеет вид

$$\langle k' | v | k \rangle = \frac{\lambda}{\Omega} v(k) v(k'), \quad (12.1)$$

где λ — параметр, определяющий интенсивность взаимодействия; $v(k)$ предполагается действительной и положительной величиной, так что $\lambda < 0$ для сил притяжения и $\lambda > 0$ для сил отталкивания.

Пусть $2P$ — полный импульс двух нуклонов; тогда уравнение (10.2) для K -матрицы можно записать в виде

$$\begin{aligned} \langle k' | K(P) | k \rangle = & \frac{\lambda}{\Omega} v(k') v(k) + \\ & + \frac{\lambda}{\Omega} \sum_{k''} \frac{v(k') v(k'') f(k'', P) \langle k'' | K(P) | k \rangle}{\epsilon(k+P) + \epsilon(k-P) - \epsilon(k''+P) - \epsilon(k''-P)}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Можно убедиться в том, что решение уравнения (12.2) имеет вид

$$\langle k' | K(P) | k \rangle = \frac{\lambda}{\Omega} \frac{v(k') v(k)}{1 + \lambda C(k, P)}, \quad (12.3)$$

$$C(k, P) = \frac{1}{\Omega} \sum_{k''} \frac{v^2(k'') f(k'', P)}{\epsilon(k''+P) + \epsilon(k''-P) - \epsilon(k+P) - \epsilon(k-P)}. \quad (12.4)$$

Если сделать разумное предположение о том, что $\epsilon(p) > \epsilon(h)$ для всех p и h , то подынтегральное выражение в (12.4) положительно (как обычно, мы переходим от суммирования к интегрированию); тогда нетрудно видеть, что $C \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow k_f$ и $P \rightarrow 0$.

Отсюда следует, что в некоторой области, где $C > 1$, разложение матричного элемента (12.3) по степеням λ расходится, хотя потенциал может быть очень слабым и несингулярным.

Другое следствие состоит в том, что при $\lambda < 0$ энергетический знаменатель в (12.3) может обращаться в нуль при некоторых значениях k и P (разумеется, если λ не превышает максимального значения C^{-1}); при этом интегралы теории Бракнера — Гаммеля становятся расходящимися.

Существование сингулярности K -матрицы можно обнаружить также с помощью теории интегральных уравнений. При

$\mathbf{P} = 0$ уравнение для K -матрицы можно записать в виде неоднородного интегрального уравнения

$$K|\mathbf{h}\rangle = v|\mathbf{h}\rangle + \sum_{\mathbf{p}} \frac{v|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|K|\mathbf{h}\rangle}{2\epsilon(\mathbf{h}) - 2\epsilon(\mathbf{p})}. \quad (12.5)$$

Рассмотрим теперь однородное интегральное уравнение

$$K|\mathbf{h}\rangle = \mu \sum_{\mathbf{p}} \frac{v|\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|K|\mathbf{h}\rangle}{2\epsilon(\mathbf{h}) - 2\epsilon(\mathbf{p})}. \quad (12.6)$$

Можно утверждать, что уравнение (12.5) имеет несингулярное решение в том и только в том случае, когда уравнение (12.6) не имеет собственного значения μ , равного единице. Далее, необходимое и достаточное условие существования разложения K по степеням v состоит в том, что все собственные значения μ по величине превосходят единицу. Указанные утверждения вытекают из обычной теории интегральных уравнений. Эмери [60] показал, что при $k \rightarrow k_f$ всегда существует одно собственное значение, стремящееся к нулю, что указывает на расходимость ряда для K . Точно так же Эмери [60], используя потенциал Бракнера — Гаммеля, показал, что в приближении эффективной массы, когда кинетическая энергия свободной частицы заменяется функцией $\epsilon(k)$, полученной умножением первой на m/m^* , уравнение (12.5) не будет иметь несингулярных решений для триплетного состояния при $m^* > 0,75m$ и для синглетного состояния при $m^* > 0,56m$.

Для синглетного состояния сами уравнения Бракнера — Гаммеля дают сингулярность для $\langle \mathbf{h}|K|\mathbf{h}\rangle$ при $h = 1,468 \text{ ферми}^{-1}$ с $k_f = 1,5 \text{ ферми}^{-1}$ (см. [14]), если при переходе через поверхность Ферми считать $\epsilon(k)$ непрерывной функцией. Сингулярность исчезает при введении предположения о наличии энергетической щели порядка 0,4 Мэв при переходе через ферми-поверхность. Ввиду того что сингулярность (если она возникает) столь близка к k_f , она не может быть обнаружена с помощью численных методов, используемых при решении уравнения Бракнера — Гаммеля. Щели в $\epsilon(k)$ при переходе через поверхность Ферми, наличие которых предполагается в приближении Бракнера — Гаммеля, по порядку величины совпадают с теми значениями, которые необходимы для подавления сингулярности.

Эмери и Сесслер [61] вычислили энергетическую щель в ядерной материи в предположении, что $k_f = 1,4 \text{ ферми}^{-1}$, а эффективная масса $m^* = m$. Найденная величина щели равна 0,1 Мэв, однако это значение оказалось чувствительным к выбору m^* и обращается в нуль при $m^* = 0,75m$. Даже если предположить существование большей щели ϵ , равной 1 Мэв (что

соответствует наблюдаемым щелям в больших конечных ядрах), ее влияние на величину средней энергии в расчете на нуклон очень мало. Если считать, что энергия Ферми E_f при $k_f = 1,5$ ферми⁻¹ составляет около 45 Мэв, то за счет влияния щели энергия, приходящаяся на одну частицу, изменится на величину, пропорциональную $\frac{3}{8}\epsilon^2/E_f$, т. е. примерно на 0,008 Мэв при $\epsilon \sim 1$ Мэв (множитель $\frac{3}{8}$ представляет собой вероятность обнаружить два нуклона в четном состоянии).

По-видимому, следует сделать вывод, что спаривание нуклонов, которое может иметь большое значение при рассмотрении возбужденных состояний тяжелых ядер, мало влияет на энергию связи, приходящуюся на частицу в ядерной материи. Полезное обсуждение этих и близких к ним вопросов можно найти в [8]¹⁾.

3. Оценка трехчастичных корреляций

Мы исходили из формулы Голдстоуна, выражающей энергию основного состояния многонуклонной системы в виде бесконечного ряда по возрастающим степеням межнуклонного потенциала. В случае сильного межнуклонного взаимодействия этот ряд заведомо не является сходящимся. Затем оказалось, что в любом порядке ряда теории возмущений имеются члены, пропорциональные различным степеням плотности. Использование t -матрицы позволило нам просуммировать бесконечные подпоследовательности членов, имеющих одинаковую зависимость от плотности в исходной формуле Голдстоуна. В частности, теория Бракнера — Гаммеля содержала вклады всех членов ряда Голдстоуна, пропорциональных плотности ρ . Логически следующий шаг должен состоять в исследовании вкладов всех членов ряда теории возмущений, пропорциональных ρ^2 , и т. д. Если обратиться к диаграммам Фейнмана, то можно сказать, что теория Бракнера — Гаммеля для случая низкой плотности учитывает все диаграммы с двумя линиями дырок. Улучшенный вариант теории должен был бы содержать все диаграммы с тремя линиями дырок и т. д.

С физической точки зрения теория Бракнера — Гаммеля строго учитывает двухчастичные корреляции и тем самым выходит за рамки одночастичного приближения. Следующий шаг состоит в строгом учете трехчастичных корреляций. Первую и важную попытку в этом направлении предпринял Бете [17] (ср. с работой Фаддеева [62]). Трехчастичные корреляции дают вклад, составляющий от 3 до 6% энергии связи, вычисленной

¹⁾ См. также В. Г. Соловьев, Влияние парных корреляций сверхпроводящего типа на свойства атомных ядер, М., 1963. — Прим. ред.

с учетом только двухчастичных корреляций. Несмотря на то что предстоит еще много работы с более реальными потенциалами взаимодействия, можно сделать вывод, что формула Голдстоуна, записанная в виде ряда по степеням плотности (или числа взаимодействующих частиц), по-видимому, дает быстро сходящийся результат. Поэтому можно считать теорию Бракнера — Гаммеля достаточно хорошо обоснованной, если критерием выбора между различными феноменологическими двухнуклонными потенциалами служит согласие с данными по ядерной энергии связи.

§ 13. ОДНОЧАСТИЧНАЯ ЭНЕРГИЯ И ЭНЕРГИЯ ПЕРЕСТРОЙКИ

Закончим настоящую главу формулировкой важной теоремы Гугенольца и Ван Хова [102] и установим связь этой теоремы с вычислением параметров ядерной материи.

Рассмотрим систему, состоящую из N частиц, и обозначим энергию этой системы при равновесном значении плотности через $E_0(N)$. Если добавить к этой системе одну частицу (которая, по предположению, займет наименьший одночастичный уровень), то можно ожидать, что возникшая система из $N+1$ частицы будет находиться в основном состоянии с энергией

$$E_0(N+1) = E_0(N) + E'_f, \quad (13.1)$$

где E'_f — энергия добавленной частицы, приблизительно равная $\epsilon(k_f)$ — энергии частицы в наивысшем занятом состоянии.

Записывая соотношение (13.1) в форме, соответствующей переходу к пределу $N \rightarrow \infty$, имеем

$$E'_f = \frac{dE_0}{dN} = \frac{d}{dN} \left(\frac{E_0}{N} N \right) = \frac{E_0}{N} + \frac{N}{\Omega} \frac{d}{d\rho} \left(\frac{E_0}{N} \right) = \frac{E_0}{N} + \rho \frac{d}{d\rho} \left(\frac{E_0}{N} \right). \quad (13.2)$$

Для системы, находящейся в равновесии, $(d/d\rho)(E_0/N) = 0$. Таким образом, мы установили, что средняя энергия, приходящаяся на частицу в равновесной системе, равна энергии частицы, занимающей наивысшее одночастичное состояние. В пределе большой системы эта энергия равна минимальной энергии, которой может обладать частица, добавленная к системе. Аналогичные рассуждения показывают также, что средняя энергия, приходящаяся на частицу, равна минимальной энергии, которую необходимо затратить для удаления частицы из системы (этую энергию часто называют энергией отделения). Следует подчеркнуть, что полученный выше результат справедлив для систем, которые можно описать в рамках модели независимых частиц. Типичным примером, где теорема

Гугенгольца — Ван Хова справедлива, является теория Хартри — Фока.

В теории Бракнера — Гаммеля

$$\epsilon(k_f) = \frac{k_f^2}{2m} + \sum_h \langle hk_f | K(\epsilon(k_f) + \epsilon(h)) | hk_f \rangle - \\ - \sum_h \langle hk_f | K(\epsilon(k_f) + \epsilon(h)) | k_f h \rangle, \quad (13.3)$$

тогда как

$$E_0 = \sum_h \frac{h^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{h, h'} [\langle hh' | K(\epsilon(h) + \epsilon(h')) | hh' \rangle - \\ - \langle hh' | K(\epsilon(h) + \epsilon(h')) | h'h \rangle]. \quad (13.4)$$

В этом случае получаем

$$E'_f = \frac{dE_0}{dN} = \frac{dE_0}{dk_f} \frac{dk_f}{dN} = \frac{\pi^2}{2\Omega k_f^2} \frac{dE_0}{dk_f} = \\ = \epsilon(k_f) + \frac{1}{2} \sum_{h, h'} \langle hh' | \frac{\partial k_f}{\partial N} \frac{\partial}{\partial k_f} \{K(\epsilon(h) + \epsilon(h'))\} | hh' - h'h \rangle = \\ = \epsilon(k_f) + R. \quad (13.5)$$

Соотношение (13.5) определяет энергию перестройки R . Таким образом, одночастичная энергия на поверхности Ферми не равна минимальной энергии, необходимой для удаления одной частицы из системы N частиц с равновесным значением плотности (после удаления образуется система из $N - 1$ частицы, также имеющая равновесное значение плотности). Разность R представляет собой энергию, которая необходима для установления равновесия в системе из $N - 1$ частицы, составлявшей до этого часть равновесной системы из N частиц. Энергия R отлична от нуля, так как K -матрица зависит от плотности (а следовательно, и от k_f). Эта зависимость обусловлена как изменением энергетического знаменателя, так и принципом Паули; ее можно представить в следующем виде:

$$K = v + v \frac{Q}{d} K, \quad (13.6)$$

поэтому мы получаем в первом порядке

$$\delta K = K \frac{\delta Q}{d} K + K Q \delta \left(\frac{1}{d} \right) K. \quad (13.7)$$

С помощью подобного подхода Бракнер и Голдмен [36] оценили энергию перестройки; она оказалась равной 10 Мэв.

Проведенная дискуссия еще раз показывает, что величина $V(p)$ в теории Бракнера — Гаммеля имеет мало общего с действительной потенциальной энергией, которой обладает добавленный к ядерной материи нуклон с произвольной энергией. Если энергия добавляемой частицы больше E'_f , то возникающее невозмущенное состояние вырождено с теми состояниями, в которых другие частицы возбуждены из сферы Ферми за счет энергии добавленной частицы. Таким образом, рассматриваемое состояние имеет конечное время жизни. Этот результат можно интерпретировать с помощью мнимой части потенциала (в оптической модели), действующего на добавленный нуклон, тогда как величины $\epsilon(p)$ в теории Бракнера — Гаммеля являются действительными. Однако мы не считаем целесообразным входить здесь в более подробное рассмотрение этого вопроса.

ЗАДАЧИ

6.1. Нейтроны и протоны рассматриваются как два состояния одной частицы — нуклона; это достигается формальным введением оператора изотопического спина с двумя собственными значениями, причем говорят, что нейtron является нуклоном с изоспином $+{1/2}$, а протон — нуклоном с изоспином $-{1/2}$. Для описания изоспина вводятся соответствующие изоспиновые матрицы (аналогично тому, как для описания обычного спина вводятся спиновые матрицы Паули)

$$\tau_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

так что

$$\tau_z \lambda_N = \lambda_N, \quad \tau_z \lambda_P = -\lambda_P,$$

где $\lambda_N = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\lambda_P = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ — собственные функции изоспина.

Показать, что двухнуклонное взаимодействие, имеющее вид

$$V(r) = V_1(r) + V_2(r) \tau_1 \cdot \tau_2,$$

не зависит от знака взаимодействующих частиц.

6.2. Показать, что в невзаимодействующем ферми-газе нуклонов вероятность найти два нуклона с относительным импульсом k равна

$$\frac{24k^2}{k_f^3} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{k}{k_f} + \frac{k^3}{2k_f^3} \right),$$

где k_f — импульс Ферми.

6.3. Пусть потенциал межнуклонного взаимодействия равен $V_0 e^{-\mu r}/\mu r$ в четных состояниях и нулю в нечетных состояниях.

Показать, что в первом порядке энергия в расчете на частицу равна

$$\frac{3}{5} \frac{k_f^2}{2m} + \frac{V_0}{16\pi} \left(\frac{k_f}{\mu} \right)^3 \left\{ 1 + \frac{6\mu^2}{k_f^2} \left(\frac{3}{8} - \frac{\mu}{16k_f} - \frac{\mu}{2k_f} \operatorname{arctg} \frac{2k_f}{\mu} \right) + \right.$$

$$\left. + \left(3 + \frac{\mu^2}{4k_f^2} \right) \frac{\mu^2}{16k_f^2} \ln \left(1 + \frac{4k_f^2}{\mu^2} \right) \right\},$$

а эффективный потенциал взаимодействия для частицы с импульсом k равен

$$V(k) = \frac{V_0}{\pi} \left\{ \frac{k_f^3}{\mu^3} + \frac{3k_f}{2k} \left[\left(\frac{1}{4} + \frac{\mu^2}{k_f^2} - \frac{\mu^2}{k^2} \right) \ln \frac{\mu^2 + (k + k_f)^2}{\mu^2 + (k - k_f)^2} + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{2k}{k_f} - \frac{2k\mu}{k_f^2} \operatorname{arctg} \frac{2k\mu}{\mu^2 + k^2 - k_f^2} \right] \right\}.$$

Глава 7

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

В гл. 5 мы исследовали зоммерфельдовскую модель металла, учитывающую кулоновское взаимодействие между электронами. При этом было обнаружено, что спектр одночастичных возбуждений очень схож со спектром идеального ферми-газа в том отношении, что в нем имеются возбужденные одночастичные состояния, лежащие непосредственно вблизи поверхности Ферми. Системы такого типа называют нормальными. В теории сверхпроводимости решающее значение имеет влияние колебаний ионной решетки на динамику электронов. Поэтому при построении теории сверхпроводимости необходимо с самого начала явно учитывать электрон-фононное взаимодействие. В этом случае энергетический спектр уже не будет нормальным. Но прежде, чем приступить к построению подобной теории, изложим кратко некоторые наиболее существенные свойства сверхпроводников. При этом попутно мы воспользуемся возможностью установить ряд качественных закономерностей, на базе которых затем будет строиться количественная теория этих явлений.

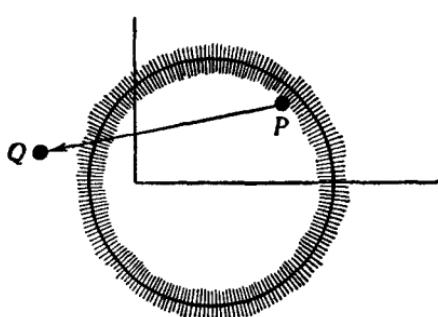
§ 2. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА СВЕРХПРОВОДНИКОВ

1. Законы подобия

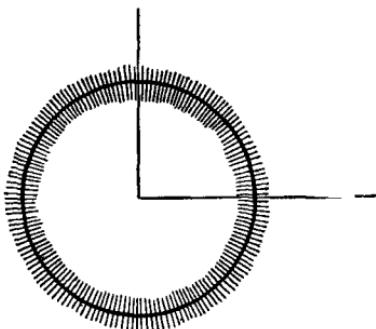
Ограничимся сначала рассмотрением так называемых „мягких“ сверхпроводников (точную классификацию см. ниже, в п. 4), для которых существуют законы подобия, позволяющие ввести приведенные величины. Некоторые из них будут даны ниже. Эти законы указывают на возможность построения, по крайней мере в первом приближении, теории сверхпроводимости без учета особенностей конкретных металлов. Такую теорию мы и будем изучать. По тем же причинам, естественно, нельзя ожидать, что теория будет отражать индивидуальные свойства конкретных металлов.

2. Обращение в нуль сопротивления постоянному току

Ниже некоторой критической температуры T_c , обычно имеющей величину порядка нескольких градусов, в сверхпроводнике возникает состояние, с которым и связано его название, а именно сверхпроводящее состояние с нулевым электрическим сопротивлением. При температурах выше T_c металл обладает нормальными свойствами. Чтобы понять смысл этого явления, рассмотрим токовое состояние в нормальном металле. Такому состоянию независимо от вида взаимодействия в системе соответствует смещенная поверхность Ферми, размытая вследствие



Фиг. 59. Токовое состояние нормального металла.



Фиг. 60. Состояние без тока.

влияния температуры. Схематически она изображена на фиг. 59. Хорошо известно, что произойдет при выключении поля. Под влиянием кристаллических дефектов и колебаний решетки отдельные электроны рассеиваются таким образом, что возникает суммарный поток электронов, выравнивающий смещение поверхности Ферми. В результате этого по истечении характерного времени релаксации устанавливается состояние, соответствующее отсутствию тока в металле; оно изображено на фиг. 60.

Однако в случае сверхпроводника токовое состояние типа изображенного на фиг. 59 сохраняется и при отсутствии внешнего поля. Иначе говоря, указанные на диаграмме одночастичные переходы типа $P \rightarrow Q$, характерные для процесса релаксации, уже не являются энергетически выгодными. Это обусловлено тем, что частица в точке P связана в пространстве импульсов с другими частицами.

Вообще говоря, мы ограничимся случаем отсутствия тока в системе и приедем к следующим выводам относительно основного состояния в сверхпроводящей системе: частицы образуют определенные связанные состояния в импульсном пространстве,

в результате чего возникает энергетическая щель (энергия связи пары частиц), которая препятствует одночастичным возбуждениям.

Здесь важно подчеркнуть, что энергетическая щель в сверхпроводнике по своему характеру принципиально отличается от щели в диэлектрике. Мы уже отметили, что положение щели в пространстве импульсов „привязано“ к распределению электронов. Тем не менее необходимо еще раз подчеркнуть, что в то время как щель в диэлектрике определяется только решеткой, т. е. формой зон Бриллюэна, щель в сверхпроводнике порождается самими электронами и движется вместе с электронами. В этом заключается принципиальное различие между сверхпроводниками и диэлектриками.

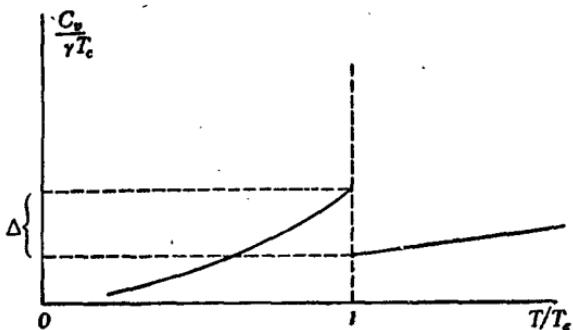
3. Низкотемпературная теплоемкость

Будем рассматривать только вклад валентных электронов в наблюдаемую теплоемкость. Значение теплоемкости позволяет оценить эффективное число степеней свободы, играющих роль в поглощении некоторого малого количества энергии. Так, например, теплоемкость идеального классического газа постоянна, в то время как для идеального ферми-газа она пропорциональна температуре T . Таким образом, теплоемкость идеального ферми-газа при достаточно низких T меньше соответствующей классической величины. Это объясняется тем, что у классического газа под действием возмущений частицы могут переходить в любое состояние, в то время как в вырожденном случае они могут перейти лишь в те состояния, которые лежат в области шириной $k_B T$ вблизи поверхности Ферми. Экспериментально установлено, что при низкой температуре теплоемкость сверхпроводника падает еще быстрее при понижении температуры. А именно поведение теплоемкости при достаточно низких температурах ($T < T_c$) описывается следующей формулой:

$$\frac{C_v}{\gamma T_c} = ae^{-bT_c/T}, \quad (2.1)$$

где γT – низкотемпературная электронная теплоемкость нормального металла. Параметры a и b слабо зависят от температуры и для всех сверхпроводников имеют соответственно величины порядка 9 и 1,5. Причиной такого поведения теплоемкости является очень малое число допустимых состояний с низкой энергией возбуждения, что подтверждает наше предположение о существовании энергетической щели в спектре элементарных возбуждений. Ход теплоемкости при низких температурах показан на фиг. 61. При $T > T_c$ зависимость теплоемкости от температуры принимает нормальный вид, а при

$T = T_c$ имеет место фазовый переход второго рода (энтропия и объем постоянны, скрытая теплота перехода равна нулю), характеризующийся скачком теплоемкости, как показано на фиг. 61. Скачок Δ для всех сверхпроводников имеет величину



Фиг. 61. Кривая теплоемкости типичного сверхпроводника.

порядка $2,5\gamma T_c$. В дальнейшем мы сначала исследуем свойства энергетической щели, после чего нам уже нетрудно будет описать фазовый переход, рассматривая его как кооперативное явление.

4. Глубина проникновения магнитного поля и длина когерентности

Как известно, сверхпроводимость разрушается приложении магнитного поля, превышающего некоторое критическое значение H_c . При $H < H_c$ поле вытесняется почти из всего образца, за исключением тонкого поверхностного слоя, толщина которого λ_L зависит от температуры γ и имеет порядок 10^{-5} см. Это явление почти идеального диамагнетизма, известное под названием эффекта Мейсснера, порождает ряд сложных теоретических проблем, которые мы здесь не будем подробно рассматривать.

Однако это явление приводит к идее о существовании длины когерентности ξ (порядка 10^{-4} см), определяющей радиус сильных корреляций, имеющих место в сверхпроводнике. Она, конечно, не совпадает с вышеупомянутой глубиной проникновения λ_L .

Представление о длине когерентности, впервые высказанное Пиппардом [164], имеет настолько фундаментальное значение, что необходимо остановиться на нем подробнее. Перечислим кратко основные положения, которые привели Пиппарда к введению этого понятия.

1) Резкий переход из нормального в сверхпроводящее состояние.

2) Независимость глубины проникновения от приложенного магнитного поля, даже при значении этого поля, близком к критическому.

3) Существование большой поверхностной энергии на границе между нормальной и сверхпроводящими фазами в критическом поле.

Пиппарт отметил, что первое положение свидетельствует о том, что сверхпроводимость является коллективным эффектом, в котором в большей или меньшей степени устраняются локальные флуктуации (например, существование локального порядка выше температуры перехода). Далее, поскольку, согласно положению 2, увеличение поля вплоть до критического меняет глубину проникновения только на 1%, естественно предположить, что возмущающее влияние поля не ограничивается слоем, в который проникает поле, а распределено по более глубокому слою порядка 10^{-4} см. Наконец, если, обращаясь к третьему положению, записать поверхностную энергию в виде $I \times H_c^2 / 8\pi$, то длина I оказывается порядка 10^{-4} см.

Другой способ оценки длины когерентности основан на использовании принципа неопределенности, что в некотором роде предвосхищает отдельные положения более поздней теории Бардина — Купера — Шриффера [11]. При этом мы считаем, что между электронами должна существовать корреляция на расстоянии Δl , связанном с неопределенностью импульса Δp соотношением

$$\Delta l \sim \frac{\hbar}{\Delta p}.$$

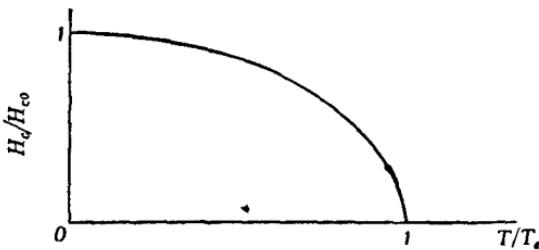
Для определения Δp нужно учесть энергию, соответствующую критической температуре T_c , и скорость v_f электронов, лежащих вблизи поверхности Ферми, ибо, как мы увидим ниже, сверхпроводящие свойства связаны только с этими электронами. Тогда имеем

$$\Delta l \sim \frac{\hbar v_f}{k T_c}.$$

Подставляя характерное значение T_c , равное нескольким градусам, и скорость v_f , соответствующую энергии Ферми ~ 5 эв, мы снова получаем $\Delta l \sim 10^{-4}$ см. Очевидно, что для дальнейшего уточнения понятия длины когерентности необходимо подробно определить волновую функцию сверхпроводящего состояния (см. § 4).

Теперь можно дать более точную классификацию сверхпроводников. Если глубина проникновения λ_L мала по сравнению с длиной когерентности ξ , то такие сверхпроводники мы будем называть „мягкими“, или сверхпроводниками первого рода. Если же $\lambda_L/\xi \gg 1$, то такие сверхпроводники, обладающие совершенно иными физическими свойствами, мы будем называть „жесткими“, или сверхпроводниками второго рода. Промежуточный случай $\lambda_L/\xi \sim 1$ более сложен, поэтому мы рассмотрим его лишь после изложения теории Гинзбурга – Ландау (см. § 9).

Здесь уместно рассмотреть главную трудность, которая на много лет задержала построение микроскопической теории



Фиг. 62. Зависимость критического поля H_c от температуры.

сверхпроводимости. Она связана с очень малой разницей свободных энергий сверхпроводящего и нормального состояний металла. Так, например, для свободных энергий F_s и F_n объема Ω можно записать соотношение

$$\frac{H_c^2}{8\pi} = \frac{F_n - F_s}{\Omega}. \quad (2.2)$$

Экспериментально наблюдаемая зависимость H_c от температуры T показана на фиг. 62. При этом величина H_{c0} достигает сотен эрстед, откуда следует, что при $T = 0$ разность $F_n - F_s$ имеет величину порядка 10^{-8} эв на атом.

Если сопоставить эту величину с характерными значениями (см. гл. 5) энергии Ферми (5 эв), обменной энергии (2–3 эв) и корреляционной энергии (около 1 эв; причем последняя обычно только приближенно оценивается методами гл. 5), то становится ясно, каких замечательных результатов добилась излагаемая ниже микроскопическая теория сверхпроводимости.

Эту энергию 10^{-8} эв можно следующим образом интерпретировать с помощью представления об энергетической щели в спектре одночастичных возбуждений. Энергия, прилагаемая при температуре перехода T_c для разрушения щели, имеет значение порядка $k_B T_c$ на один электрон. С другой стороны,

естественно предположить, что при температурах, незначительно превышающих T_c , электроны образуют нормальную ферми-систему. Отсюда следует, что в переходе должна принимать участие только та часть электронов, которая находится вблизи поверхности Ферми в узкой области шириной порядка $k_B T_c$, где плотность состояний равна ρ . Тогда полное изменение энергии при переходе равно $(k_B T_c) (\rho k_B T_c)$; эта величина имеет порядок 10^{-8} эв.

5. Изотопический эффект

Было обнаружено, что во многих сверхпроводниках критическая температура T_c зависит от средней массы изотопа M . Точнее, для любого конкретного металла должно в первом приближении выполняться соотношение (обзор экспериментальных данных см. в работе Гарланда [74])

$$T_c M^{1/2} = \text{const.} \quad (2.3)$$

Поскольку, как уже говорилось выше, критическая температура T_c пропорциональна H_c , то между H_c и M должно существовать соотношение типа (2.3).

Поясним, почему изотопический эффект столь важен для построения теории. Мы уже убедились в том, что для образования энергетической щели на поверхности Ферми необходимо наличие связанного состояния электронов. Возникновение такого состояния могут обусловливать только силы взаимного притяжения, а сильное отталкивательное экранированное кулоновское взаимодействие неэффективно в этом отношении (см., однако, работу Латтинжера [135]). Более того, минимальное требование к такому притяжению состоит в том, что оно должно действовать только между электронами вблизи поверхности Ферми; тогда остальные вынуждены преодолевать энергетическую щель при одиночстичных переходах в силу обычного распределения Ферми.

Пока не был обнаружен изотопический эффект, физическая природа такого взаимодействия была неясна (хотя Фрелих в 1950 г. [69] указал на значение взаимодействия с решеткой и теоретически предсказал изотопический эффект). Впоследствии, однако, многие исследователи пытались объяснить притяжение между электронами путем явного учета решетки.

Такой подход оказался успешным. Теоретическое изучение взаимодействия в электрон-фононной системе показало, что можно исключить фононные переменные. При этом экранированное кулоновское взаимодействие между электронами модифицируется таким образом, что появляется дополнительное

притяжение между парой частиц, лежащих достаточно близко от поверхности Ферми. Предложенный Фрелихом вывод такого притяжения приведен в приложении VIII.

Бардин и Пайнс [12] предложили другой достаточно хорошо известный способ. Для нас сейчас не существенны детали, которыми различаются эти два подхода. Излагаемая ниже теория БКШ учитывает такое взаимодействие лишь в наиболее грубом виде, общем для обоих подходов. На самом деле никакое взаимодействие, не зависящее от времени (типа вышеупомянутых), не может быть правильным в принципе, что можно показать элементарным рассуждением, приведенным несколько ниже. Кстати говоря, наиболее важной особенностью уточненной теории БКШ как раз и является учет зависимости от времени (см., например, монографии Шриффера [183] и Рикайзена [173]).

Часто используется простая физическая модель, а именно рассматривается электрон, который при своем движении в решетке поляризует ее. Последнее связано с тем, что вблизи электрона решетка деформируется таким образом, чтобы образовался компенсирующий положительный заряд. Следовательно, при движении электрона за ним остается положительно заряженное облако, которое, пока оно не срелаксировало, может притягивать другой электрон. Таким образом, два электрона оказываются косвенно связанными притягивающим взаимодействием.

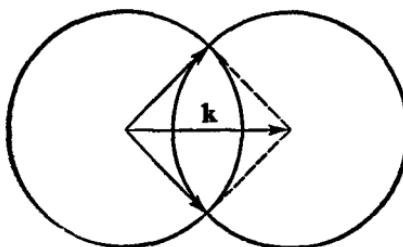
Если ω — частота нулевых колебаний иона, то энергия возмущения нормального электронного газа такими колебаниями решетки равна $\hbar\omega \sim 10^{-1}$ эв на ион. Эта величина и определяет эффективную ширину слоя на поверхности Ферми, внутри которого существует притяжение между электронами. Необходимо отметить, что рассматриваемые нами фононы являются виртуальными. Они возбуждаются при прохождении электронов через решетку даже при абсолютном нуле. При более высоких температурах доминируют, конечно, тепловые фононы, которые (частично) обусловливают сопротивление электрическому току.

§ 3. ГИПОТЕЗА О СПАРИВАНИИ

Воспользуемся теперь проведенным выше качественным рассмотрением для введения следующего допущения. Предположим, что механизмом, обеспечивающим сверхпроводимость, является притяжение между двумя образующими пару частицами, состояние каждой из которых лежит внутри некоторой энергетической оболочки толщиной 2δ на поверхности Ферми.

Для тех металлов, в которых имеет место изотопический эффект, можно заменить δ на $\hbar\omega$.

Такое допущение дает нам критерий построения потенциала взаимодействия в сверхпроводящем состоянии. Необходимо, однако, подчеркнуть, что нам придется столкнуться с многочастичным уравнением Шредингера, общих методов решения которого не существует. Как показывает имеющийся опыт решения многочастичных задач, для каждого конкретного типа потенциала взаимодействия необходимо сначала интуитивно представить себе основные физические свойства системы, а уже после этого переходить к формальному решению задачи.



Фиг. 63.

Оставшаяся часть этого параграфа посвящена исследованию наиболее характерных физических свойств, связанных со сделанным выше допущением.

Прежде всего нас интересует притяжение между частицами, находящимися вблизи поверхности Ферми. В связи с этим рассмотрим элементарные акты рассеяния, обусловленного таким притяжением. Они могут быть классифицированы по значению полного импульса пары k . При этом возникает следующий вопрос: какое количество пар с произвольно заданным значением k имеется в рассматриваемой энергетической оболочке? Ответ можно получить следующим образом. Построим две сферические оболочки радиусом k_f таким образом, чтобы вектор, соединяющий их центры, был равен k . Пусть левая из этих оболочек (фиг. 63) соответствует поверхности Ферми, тогда как правая нужна только для геометрических построений. Искомыми парами будут частицы, лежащие в диаметрально противоположных точках пересечения двух сфер; сумма их импульсов равна k . При бесконечно малой толщине оболочки δ число таких пар определяется в общем случае половиной длины окружности, по которой пересекаются рассматриваемые сферы. Однако при $k = 0$ имеет место совершенно иной случай. При этом сферы совпадают друг с другом, а соответствующее

число пар определяется площадью половины поверхности Ферми. Отсюда становится ясно, что вблизи поверхности Ферми число пар с нулевым импульсом в неизмеримое число раз превышает число пар с любым отличным от нуля значением импульса.

Поэтому далее основное внимание мы будем уделять именно этим, особенно многочисленным парам с нулевым импульсом, и выясним, может ли их изучение привести к объяснению существования сверхпроводящего основного состояния.

1. Куперовские пары

Покажем, что при образовании пар описанного выше типа с нулевым суммарным импульсом может, по-видимому, возникать интересующая нас энергетическая щель. Априори это не очевидно, так как каждый электрон имеет энергию Ферми порядка 5 эв. Однако следует иметь в виду, что рассматриваемые два электрона находятся не в свободном пространстве, а в среде подобных частиц и что возникновение связанного состояния электронов обусловливается тем же принципом Паули, который приводит к возникновению поверхности Ферми и кинетической энергии ~ 5 эв.

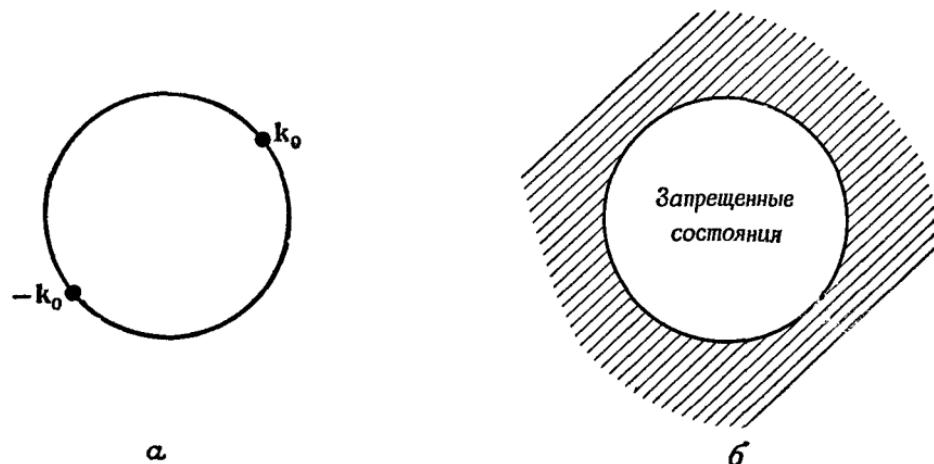
Сначала рассмотрим набор невзаимодействующих фермионов. Затем выберем два фермиона, расположенных на поверхности Ферми и имеющих равный нулю суммарный импульс, и включим взаимодействие между ними. При этом остальные частицы по-прежнему не взаимодействуют друг с другом и с двумя выделенными частицами. Они служат только для заполнения состояний внутри сферы Ферми. Тогда две выделенные частицы будут взаимодействовать и неоднократно рассеиваться друг на друге в соответствии с законами сохранения. В частности, сохраняется полный импульс пары, так что она должна в результате рассеяния переходить в другое состояние с нулевым полным импульсом. Единственное ограничение состоит в том, что выбранные частицы не могут переходить в уже целиком заполненные состояния, лежащие ниже поверхности Ферми. Через бесконечно большой промежуток времени после включения взаимодействия (ср. гл. 4, § 5) устанавливается стационарное состояние. Состояния при $t = -\infty$ и $t = 0$ схематически изображены на фиг. 64, а и б. Здесь мы имеем обычное размазывание, связанное с взаимодействием, которое в данном случае охватывает только две частицы.

Невозмущенная энергия пары равна $2E_f$, где $E_f = \hbar^2 k_f^2 / 2m$ — энергия Ферми. Чтобы установить, возникает ли при этом связанное состояние частиц, необходимо исследовать основное

состояние уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + v(r_1, r_2) \right] \psi = E\psi, \quad (3.1)$$

где потенциал v соответствует взаимодействию в сверхпроводящем состоянии. Мы должны ясно показать, что соответствующее собственное значение меньше $2E_f$. Для решения этого уравнения воспользуемся стандартным приемом и разложим ψ по невозмущенным (т. е. соответствующим $v=0$) возбужденным состояниям. Согласно нашему предварительному



Фиг. 64. Влияние взаимодействия на двухчастичные состояния.

рассмотрению, такими состояниями являются парные произведения плоских волн с импульсами \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$, т. е. двухчастичные состояния типа $\Omega^{-1} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]$ при $k > k_f$ с собственными значениями $E_k = \hbar^2 k^2 / m$.

Для рассмотрения этой конкретной задачи наличие двух спиновых состояний является несущественным. Поэтому мы будем считать, что в каждом импульсном состоянии находится одна частица. Тогда возмущенную волновую функцию, удовлетворяющую уравнению (3.1), можно искать в виде

$$\psi = \sum_{k' > k_f} C_{k'} \frac{e^{ik' \cdot (r_1 - r_2)}}{\Omega}, \quad (3.2)$$

где коэффициенты $C_{k'}$ еще предстоит определить. Подставляя (3.2) в (3.1), получаем

$$\sum_{k' > k_f} C_{k'} [E_{k'} - E + v(r_1, r_2)] \frac{e^{ik' \cdot (r_1 - r_2)}}{\Omega} = 0 \quad (3.3)$$

или после умножения на $e^{-ik \cdot (r_1 - r_2)}$ и интегрирования по r_1 и r_2

$$(E_k - E) C_k = - \sum_{k' > k_f} C_{k'} v(k, -k, k', -k'), \quad (3.4)$$

где

$$v(k, -k, k', -k') = \int \int \frac{e^{-ik \cdot r_1}}{\sqrt{\Omega}} \frac{e^{ik' \cdot r_2}}{\sqrt{\Omega}} v(r_1, r_2) \frac{e^{ik' \cdot r_1}}{\sqrt{\Omega}} \frac{e^{-ik' \cdot r_2}}{\sqrt{\Omega}} dr_1 dr_2. \quad (3.5)$$

Теперь нам необходимо выбрать взаимодействие в соответствии с допущением относительно типа взаимодействия, обеспечивающего сверхпроводимость. Возьмем взаимодействие в виде

$$v(k, -k, k', -k') = \begin{cases} -v\Omega^{-1} & \text{при } E_f < E_k, E_{k'} < E_f + \delta, \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (3.6)$$

т. е. будем считать, что состояния, участвующие во взаимодействии (заштрихованная часть на фиг. 64, б), лежат в узкой энергетической зоне ($E_f, E_f + \delta$). Необходимо также отметить следующие особенности. Энергетическая оболочка не может симметрично сместиться относительно уровня Ферми, так как данные две частицы не могут проникнуть в полностью заполненную зону. Матричные элементы для состояний, лежащих внутри оболочки, считаем (для простоты) константами. Ясно, что наше приближение состоит в замене определенных физических матричных элементов внутри оболочки некоторым средним значением. Выбор знака минус отражает притягивающий характер взаимодействия, а множитель Ω^{-1} добавлен для того, чтобы потенциал v в правой части (3.5) был порядка единицы относительно Ω .

Подставляя теперь v из (3.6) в (3.4), получаем

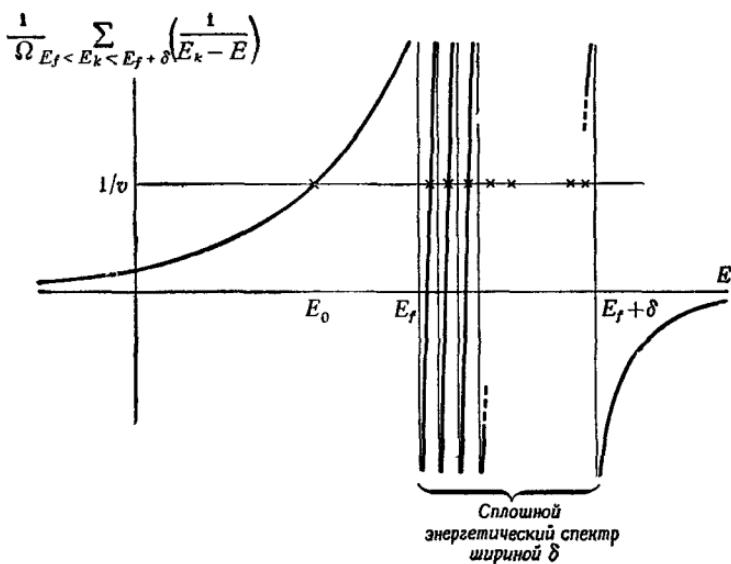
$$C_k = \frac{v}{E_k - E} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{E_f < E_{k'} < E_f + \delta} C_{k'}. \quad (3.7)$$

В общем случае решение такого секулярного уравнения очень сложно, но в рассматриваемом конкретном случае вычисление собственных значений производится относительно просто. Члены с C_k можно сразу исключить путем суммирования обеих частей (3.7) по значениям k , лежащим в энергетической области ($E_f, E_f + \delta$), с последующим сокращением множителя $\sum_{E_f < E_k < E_f + \delta} C_k$, общего для обеих сторон. После этого получаем

следующее уравнение для нахождения собственных значений E :

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{\Omega} \sum_{E_f < E_k < E_f + \delta} \frac{1}{E_k - E}. \quad (3.8)$$

Корни уравнения (3.8) можно найти с помощью известного графического метода, изображая обе части уравнения как функции от E и находя точки пересечения кривых (фиг. 65). При $v > 0$ левая часть представляет собой прямую линию, проходящую в верхней полуплоскости параллельно оси E .



Ф и г. 65. Образование куперовских пар.

Если же обратиться к правой части (3.8), то сразу видно, что при изменении E от E_f до $E_f + \delta$ эта функция быстро и много-кратно пробегает все значения от $+\infty$ до $-\infty$, причем каждый раз она проходит через значение $1/v$. Таким образом, в этой области мы получаем непрерывную совокупность решений уравнения (3.8). Очень важно для нас наличие части кривой, лежащей ниже E_f и отделенной от участка сплошного спектра (ср. исследование плазмонов в гл. 5). Эта ветвь монотонно убывает до нуля при $E \rightarrow -\infty$ и пересекает значение $1/v$ при некотором не зависящем от объема значениях энергии E_0 , лежащем ниже уровня Ферми; оно и соответствует искомому низколежащему связанному состоянию.

2. Величина энергии связи

После того как было показано существование низшего уровня E_0 , вычисление энергии связи $E_f - E_0$ уже не представляет труда. Применяя уравнение (3.8) конкретно к основному состоянию ($E = E_0$), введем плотность состояний ρ свободных частиц с помощью обычной замены

$$\frac{1}{\Omega} \Sigma \rightarrow \int d\epsilon \rho(\epsilon); \quad (3.9)$$

при этом получаем

$$\frac{1}{v} = \int_{E_f}^{E_f + \delta} \frac{\rho(\epsilon)}{\epsilon - E_0} d\epsilon. \quad (3.10)$$

При вычислении этого интеграла не может возникнуть сложностей из-за расходности, так как знаменатель подынтегрального выражения положителен во всей области интегрирования. В соотношение (3.10) можно подставить явное выражение ρ для случая свободных частиц, но поскольку далее при исследовании плотности состояний в системе обычных электронов нам придется прибегнуть к более точному приближению, мы воспользуемся этим приближением также и здесь. Оно основано на том, что значение $(\epsilon - E_0)^{-1}$ бесконечно велико в непосредственной близости от области интегрирования, быстро падая до конечных значений при увеличении ϵ [и уж заведомо при $\epsilon = E_f + \delta$, в чем можно убедиться с помощью (3.11)]. Поэтому можно считать, что в области $(E_f, E_f + \delta)$ величина $(\epsilon - E_0)^{-1}$ меняется значительно быстрее, чем функция плотности состояний ρ . Так как величина δ мала, мы приближенно заменим функцию $\rho(\epsilon)$ ее значением на поверхности Ферми, затем преобразуем получаемый при этом элементарный логарифмический интеграл и получим энергию связи в виде

$$E_f - E_0 = \frac{\delta}{e^{1/\rho v} - 1} \approx \delta e^{-1/\rho v}. \quad (3.11)$$

Последнее приближенное равенство верно при условии $e^{1/\rho v} \gg 1$. Если учесть, что для металлов, согласно экспериментальным данным, $E_f - E_0 \sim 10^{-4}$ эв, $\delta \sim 10^{-1}$ эв, то в этом случае величина $e^{1/\rho v}$, очевидно, действительно велика. Отметим теперь, что наличие сферы Ферми существенно для образования связанного состояния выделенной пары электронов. Действительно, при обращении в нуль величины k_f обращается в нуль и ρ , а следовательно, и величина (3.11).

Мы не будем больше задерживаться на этом примере. Наиболее существенное его свойство уже рассмотрено. Выяснилось, что частицы самого многочисленного класса пар вблизи поверхности Ферми, обладающие нулевым суммарным импульсом, могут при включении сверхпроводящего взаимодействия образовывать конденсат связанных пар. Энергия связи, приходящаяся на одну пару, не зависит от объема и определяется соотношением (3.11). Однако, несмотря на малость этой энергии, ее функциональная структура такова, что ее нельзя разлагать в ряд по параметру взаимодействия v . Следовательно, при многочастичном обобщении такого метода довольно трудно применить теорию возмущений, поэтому чаще всего прибегают к вариационным методам.

Основываясь на полученных результатах, сделаем теперь фундаментальное предположение, на котором основана вся многочастичная теория сверхпроводимости. Совокупность частиц в энергетической оболочке на поверхности Ферми, взаимодействие между которыми является притягивающим и обуславливает сверхпроводимость, характеризуется тем, что частицы с противоположными импульсами и спинами конденсируются, образуя связанные пары.

Мы не будем больше обсуждать предположение о противоположном направлении импульсов. Требование противоположно направленных спинов, однако, до сих пор еще не упоминалось. Если мы принимаем предположение о том, что взаимодействуют частицы с противоположными импульсами, то определить знак спинов можно по экспериментальным данным. Понятно, взаимодействие параллельных спинов не влияет на обычный спиновый парамагнетизм Паули нормальных электронов. С другой стороны, образование пар на поверхности Ферми должно в значительной степени препятствовать переворачиванию спинов, так как последнее приводит к разрушению пар. Наблюдаемый нейтровский сдвиг, который еще не получил объяснения во всех деталях, в основном говорит в пользу противоположного направления спинов у частиц пары. Теоретически это также кажется вполне правдоподобным. При прочих равных условиях учет обменного эффекта также говорит в пользу антипараллельной ориентации спинов при наличии притяжения. (В качестве иллюстрации этого положения весьма поучительно провести простое вычисление среднего значения гамильтонiana двух взаимодействующих частиц относительно детерминантных состояний, соответствующих параллельной и антипараллельной ориентации спинов.)

Как было показано выше, рассмотрение основных свойств сверхпроводника довольно естественно приводит нас к гипотезе

о существовании нового типа межэлектронного взаимодействия с участием фононов, примером которого является фрёлиховское взаимодействие (см. приложение IX). Таким образом, теорию можно сформулировать, основываясь на представлении о связанных парах электронов, как это и было впервые предположено Купером [47]. При этом грубая оценка энергии связи дает правильный порядок величины. Следовательно, мы можем построить полную многочастичную теорию сверхпроводящего состояния, чему в основном и посвящена оставшаяся часть главы.

§ 4. ТЕОРИЯ БАРДИНА — КУПЕРА — ШРИФФЕРА (БКШ)

Чтобы сосредоточить внимание на наиболее принципиальных аспектах проблемы и прежде всего максимально упростить детальное рассмотрение, сделаем несколько разумных предположений. Их удобно выразить путем упрощения гамильтонiana, которое мы сейчас и проведем.

1. Модельный гамильтониан БКШ

Главная проблема сводится к определению основного состояния системы фермионов, в которой имеет место как экранированное кулоновское взаимодействие, так и взаимодействие, приводящее к сверхпроводимости. Проведенное выше рассмотрение двухчастичной задачи дает нам достаточно веские основания предположить, что для описания основных свойств сверхпроводящей фазы решающую роль играет межэлектронное притяжение, приводящее к образованию пар, а не экранированное кулоновское отталкивание. Поэтому мы будем полностью преубеждать последним.

Теперь нам остается лишь решить вопрос о выборе многочастичного взаимодействия в сверхпроводнике. Будем руководствоваться выводами, сделанными в предыдущем параграфе. Итак, нашей физической моделью является газ ферми-частиц, которые не взаимодействуют между собой, за исключением частиц, образующих связанные пары вблизи поверхности Ферми. Эти пары могут рассеиваться одна на другой, причем полный импульс и индивидуальные спины всегда сохраняются. Акты рассеяния между частицами, принадлежащими к различным парам, запрещены, ибо они привели бы к разрушению пар.

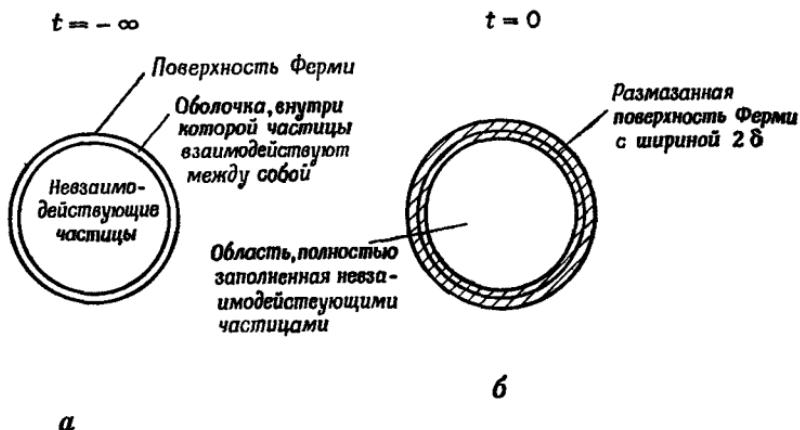
Таким образом, мы приходим к следующей формулировке многочастичной задачи. Сначала имеется система независимых фермионов, описываемых гамильтонианом

$$H_0 = \sum \epsilon_K a_K^\dagger a_K. \quad (4.1)$$

Обозначив через K одночастичное состояние с импульсом \mathbf{k} и спином \uparrow , а через $-K$ состояние $-\mathbf{k}, \downarrow$, запишем взаимодействие, которое в соответствии с вышерассмотренным механизмом возникает при $t = -\infty$, в виде

$$V = \frac{1}{2} \sum_{26} V_{KK'} a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K''}. \quad (4.2)$$

Суммирование здесь проводится по состояниям E_k и $E_{k'}$, лежащим в энергетической оболочке толщиной 2δ вблизи поверхности Ферми (фиг. 66). Матричные элементы $V_{KK'}$ в (4.2) предполагаются отрицательными (что соответствует притяжению).



Фиг. 66. Влияние взаимодействия на многочастичные состояния.
Вне сферы Ферми в обоих случаях нет частиц.

Следовательно, нам предстоит исследовать волновую функцию, меняющуюся от момента времени $t = -\infty$ и соответствующую к рассматриваемому моменту времени стационарному состоянию системы с модельным гамильтонианом

$$H = H_0 + V. \quad (4.3)$$

Нетрудно обнаружить сильное сходство с куперовской двухчастичной задачей. Однако там на поверхности Ферми были выделены только две частицы K и $-K$ и изучалось их рассеяние в оболочке вблизи поверхности Ферми. Здесь может рассеиваться много таких пар, что, конечно, сильно усложняет задачу. Действительно, в предыдущем случае мы знали, что выделенная пара может свободно рассеиваться в энергетической оболочке, а теперь подобное рассеяние ограничено из-за того, что нужные состояния могут оказаться заполненными другими частицами. Иначе говоря, задача становится существенно многочастичной.

2. Волновая функция БКШ

Теперь уже можно без дополнительных приближений найти волновую функцию основного состояния гамильтониана (4.3) с точностью до членов порядка $O(1/N)$. Эта волновая функция совпадает с использованной Бардином, Купером и Шриффером [11]. Однако здесь при изложении теории мы применим метод БКШ, предложенный в оригинальной работе названных авторов, где была введена волновая функция, которая использовалась в качестве очень удобной пробной функции для вариационного решения задачи. Рассмотрим следующую пробную волновую функцию:

$$|\psi\rangle = \prod_{K>0} (u_K + v_K a_K^\dagger a_{-K}^\dagger) |0\rangle, \quad (4.4)$$

где u_K и v_K — действительные величины, удовлетворяющие условиям

$$u_K = u_{-K} = u_k, \quad v_K = -v_{-K} = v_k, \quad (4.5)$$

а также условию нормировки

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (4.6)$$

Согласно принятым обозначениям, $K = k, \uparrow$ и $-K = -k, \downarrow$; следовательно, с учетом соотношений (4.5) и антикоммутационных соотношений для операторов a , ограничение $K > 0$ означает, что в произведении (4.4) все множители $(u_K + v_K a_K^\dagger a_{-K}^\dagger)$ различны.

Необходимо признать, что физический смысл и преимущества выбора функции (4.4) совершенно не очевидны. Сейчас мы зайдемся подробным исследованием ее свойств и вытекающих из них результатов, что поможет нам понять ее физический смысл.

3. Свойства пробной волновой функции

Укажем сначала, что в определении (4.4) нет неоднозначности, так как различные сомножители типа

$$(u_K + v_K a_K^\dagger a_{-K}^\dagger)$$

коммутируют.

Кроме того, любая пробная волновая функция такого рода должна каким-то образом учитывать корреляцию между парой частиц, у которых суммарный импульс и спин равны нулю. Ясно, что форма (4.4) удовлетворяет этому требованию. Само по себе такое утверждение едва ли можно считать достаточным, однако позже мы увидим, что здесь корреляция учитывается особенно удачным образом. Далее, детерминантная вол-

новая функция состояний, лежащих ниже поверхности Ферми, также содержится в (4.4), в чем можно убедиться, полагая

$$\left. \begin{array}{l} u_K = 0 \\ v_K = 1 \end{array} \right\} \quad (k < k_f); \quad \left. \begin{array}{l} u_K = 1 \\ v_K = 0 \end{array} \right\} \quad (k > k_f). \quad (4.7)$$

Подставляя эти величины непосредственно в (4.4), находим

$$\prod_{\substack{K \geq 0 \\ k \leq k_f}} a_K^+ a_{-K}^+ |0\rangle = \prod_{k < k_f} a_k^+ |0\rangle. \quad (4.8)$$

На последнем этапе мы будем пользоваться u_K и v_K как вариационными параметрами, поэтому простой результат (4.7) может пригодиться нам в дальнейшем.

Здесь нам следует рассмотреть еще одно свойство волновой функции (4.4), заключающееся в том, что она не соответствует никакому заранее определенному и фиксированному числу частиц. Имеем

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = & \left(\prod u_K \right) \left(1 + \sum \frac{v_K}{u_K} a_K^+ a_{-K}^+ + \right. \\ & + \sum \frac{v_K}{u_K} \frac{v_L}{u_L} a_K^+ a_{-K}^+ a_L^+ a_{-L}^+ + \dots \Big) |0\rangle = \\ & = \left(\prod u_K \right) (|\varphi_0\rangle + |\varphi_2\rangle + |\varphi_4\rangle + \dots), \end{aligned} \quad (4.9)$$

где $|\varphi_i\rangle$ означает (ненормированную) волновую функцию для i частиц. Естественно возникает вопрос, зачем понадобилось выбрать волновую функцию, не являющуюся собственным состоянием оператора числа частиц. Это сделано просто для удобства вычислений. Такой подход, как будет показано ниже, позволяет использовать вариационный метод для функций φ_N в приведенном выше разложении (для которых число частиц постоянно), и вместе с тем дает возможность обойти неизбежно возникающие математические трудности. Физические свойства состояния, описываемого волновой функцией $|\varphi_N\rangle$, можно понять, если, следуя Блатту [20], представить ее в виде

$$|\varphi_N\rangle = \left(\sum \frac{v_K}{u_K} a_K^+ a_{-K}^+ \right)^{N/2} |0\rangle.$$

Таким образом, эта функция соответствует наличию $N/2$ коррелированных пар. Амплитуда любого состояния в виде детерминанта 2×2 , составленного из плоских волн с индексами K и $-K$, определяется отношением v_K/u_K .

Наконец, учитывая, что $u_K + v_K a_K^+ a_{-K}^+$ при $K \neq L$ коммутирует не только с $u_L + v_L a_L^+ a_{-L}^+$, но также с ее комплексно

сопряженной величиной, получаем

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle 0 | \prod (u_K + v_K a_{-K} a_K) (u_K + v_K a_K^\dagger a_{-K}^\dagger) | 0 \rangle = \prod (u_K^2 + v_K^2) = 1, \quad (4.10)$$

где последнее равенство является следствием условия (4.6). Следовательно, волновая функция БКШ нормирована.

4. Вакуумное состояние

Существует довольно простой набор ферми-операторов, для которых волновая функция БКШ является вакуумным (основным) состоянием. Они имеют вид

$$a_K = u_K a_K - v_K a_{-K}^\dagger, \quad a_K^\dagger = u_K a_K^\dagger - v_K a_{-K}, \quad (4.11)$$

и в силу (4.5)

$$a_{-K} = u_K a_{-K} + v_K a_K^\dagger, \quad a_{-K}^\dagger = u_K a_{-K}^\dagger + v_K a_K. \quad (4.12)$$

Определенные таким образом операторы a представляют собой ферми-операторы, т. е.

$$\begin{aligned} a_K^\dagger a_L + a_L a_K^\dagger &= \delta_{KL}, \\ a_K^\dagger a_L^\dagger + a_L^\dagger a_K^\dagger &= 0, \\ a_K a_L + a_L a_K &= 0, \end{aligned} \quad (4.13)$$

в чем можно убедиться непосредственно, подставляя определение (4.11) и используя антисимметрические свойства операторов a , а также условие (4.6), которому должны удовлетворять величины u и v .

Далее, $|\Psi\rangle$ является вакуумным состоянием для операторов a

$$a_K |\Psi\rangle = 0 \quad (\text{для всех } K). \quad (4.14)$$

Чтобы доказать это утверждение, выразим левую часть соотношения (4.14) через операторы a и a^\dagger . Разобьем вычисления на два шага. Для оператора a_K имеем

$$\begin{aligned} a_K \prod_{L>0} (u_L + v_L a_L^\dagger a_{-L}^\dagger) |0\rangle &= a_K (u_K + v_K a_K^\dagger a_{-K}^\dagger) \prod_{\substack{L>0 \\ L \neq K}} (u_L + v_L a_L^\dagger a_{-L}^\dagger) |0\rangle = \\ &= (u_K a_K + v_K [1 - a_K^\dagger a_K] a_{-K}^\dagger) \prod_{\substack{L>0 \\ L \neq K}} (u_L + v_L a_L^\dagger a_{-L}^\dagger) |0\rangle = \\ &= (u_K a_K + v_K a_{-K}^\dagger + v_K a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_K) \prod_{\substack{L>0 \\ L \neq K}} (u_L + v_L a_L^\dagger a_{-L}^\dagger) |0\rangle = \\ &= v_K a_{-K}^\dagger \prod_{\substack{L>0 \\ L \neq K}} (u_L + v_L a_L^\dagger a_{-L}^\dagger) |0\rangle \quad (4.15) \end{aligned}$$

(два члена в предпоследней строчке исчезают из-за того, что оператор a_K коммутирует со всеми членами под знаком произведения, и, следовательно, действуя непосредственно на вакуумное состояние $|0\rangle$, дает нуль).

Аналогичным образом находим

$$a_{-K}^\dagger \prod_{L>0} (u_L + v_L a_L^\dagger a_{-L}^\dagger) |0\rangle = u_K a_{-K}^\dagger \prod_{\substack{L>0 \\ L \neq K}} (u_L + v_L a_L^\dagger a_{-L}^\dagger) |0\rangle. \quad (4.16)$$

Умножая (4.15) на u_K , а (4.16) на v_K и вычитая одно соотношение из другого, получаем искомый результат (4.14).

Следует отметить, что если записывать величины u и v в форме детерминанта (4.7), то операторы a будут совпадать по форме с операторами b , определяемыми соотношениями (3.9.5). Окончательные значения u и v , соответствующие сверхпроводящему состоянию, очень близки к значениям (4.7), поскольку энергия перехода в нормальное состояние очень мала.

5. Возбужденные состояния

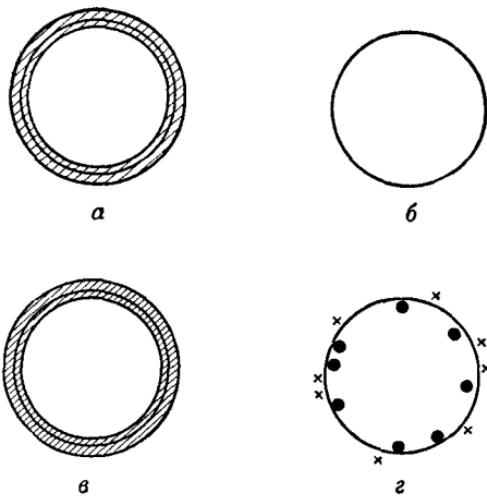
Используя характерные для фермионов соотношения (4.13) и свойство вакуумного состояния (4.14), можно получить набор одночастичных возбужденных состояний системы. Это можно сделать по аналогии с описанием в терминах частиц — дырок, рассмотренным в гл. 3. Нормированные возбужденные состояния записываются в виде

$$a_{K_1}^\dagger a_{K_2}^\dagger \dots a_{K_n}^\dagger a_{K'_1}^\dagger a_{K'_2}^\dagger \dots a_{K'_n}^\dagger |\psi\rangle, \quad (4.17)$$

где операторы a_K ($a_{K'}$) соответствуют импульсам, большим (меньшим) импульса Ферми k_f . Это ограничение, налагаемое на значения импульсов в (4.17), должно обеспечить взаимно однозначное соответствие возбужденных состояний в системах с взаимодействием и без него.

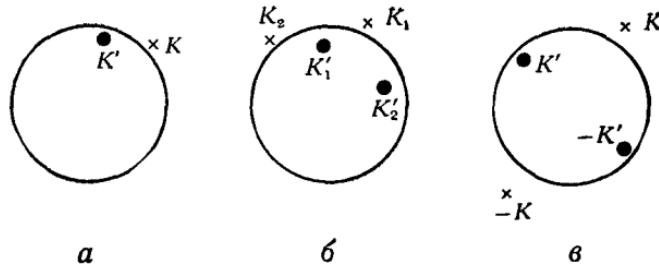
Такое взаимно однозначное соответствие дает нам удобный способ описания всех одночастичных возбуждений волновой функции БКШ. Можно, конечно, рассматривать обычное \mathbf{k} -пространство и размазанную поверхность Ферми, как это сделано на фиг. 66, б. Однако в этом случае трудно изобразить возбужденные состояния: На фиг. 67 показано, как можно решить эту проблему, используя соответствующее нормальное состояние, для которого изображение возбуждений не представляет особого труда.

Так, например, на фиг. 68 изображены некоторые простые типы возбужденных состояний относительно \mathbf{k} -пространства.



Фиг. 67. Изображение возбужденных состояний.

a — сверхпроводящее основное состояние, *b* — соответствующее нормальное основное состояние (нет ни дырок, ни частиц), *c* — сверхпроводящее возбужденное состояние (чтобы указать на его отличие от состояния *a*, использована более плотная штриховка, однако такой способ неудобен), *d* — соответствующее нормальное возбужденное состояние, в котором имеется одинаковое число частиц и дырок. Легко установить его соответствие сверхпроводящему возбужденному состоянию.



Фиг. 68. Некоторые простые возбужденные состояния.

a — возбужденное состояние $a_K^+ a_{K'}^+ \psi$, *b* — возбужденное состояние $a_{K_1}^+ a_{K_2}^+ a_{K'_1}^+ a_{K'_2}^+ \psi$, *c* — возбужденная пара $a_K^+ a_{-K}^+ a_{K'}^+ a_{-K'}^+ \psi$.

Простейшее из них (не противоречащее сохранению частиц в нормальном состоянии) приведено на фиг. 68, а. Это состояние $a_K^+ a_{K'}^- |\Psi\rangle$ получается из основного при разрушении пары K' , $-K'$. Несколько более сложное возбужденное состояние $a_{K_1}^+ a_{K_2}^+ a_{K'_1}^+ a_{K'_2}^- |\Psi\rangle$ изображено на фиг. 68, б. Для его образования из основного состояния в общем случае требуется разрушить две связи: между K'_1 и $-K'_1$ и между K'_2 и $-K'_2$. В частном случае при $K'_1 = -K'_2$ две пары, находящиеся ниже поверхности Ферми, неразличимы. Например, фиг. 68, в соответствует „возбужденной паре“, при образовании которой пара с индексом K' рассеивается, порождая пару с индексом K .

6. Распределение по импульсам

Выше мы установили целый ряд интересных и полезных свойств на базе предположения о том, что волновая функция (4.4) может быть использована для описания основного состояния. Дадим теперь некоторое обоснование этого допущения.

Во-первых, отметим, что введение операторов a , определяемых соотношением (4.11) и обладающих свойством (4.14), не только имеет большой физический смысл, но и обладает попутно еще одним важным достоинством. Очень часто вычисление средних значений операторов, записанных через a и a^\dagger , относительно волновой функции БКШ можно упростить, выражая эти операторы через a и a^\dagger . Для этого, конечно, желательно иметь соответствующие выражения операторов a и a^\dagger через a и a^\dagger . Их легко получить из (4.11)

$$a_K = u_K a_K + v_K a_{-K}^\dagger, \quad a_K^\dagger = u_K a_K^\dagger + v_K a_{-K} \quad (4.18)$$

и

$$a_{-K} = u_K a_{-K} - v_K a_K^\dagger, \quad a_{-K}^\dagger = u_K a_{-K}^\dagger - v_K a_K. \quad (4.19)$$

В качестве примера применения такого способа проведем вычисление функции распределения $\langle \Psi | a_K^\dagger a_K | \Psi \rangle$ по импульсам.

Рассмотрим сначала функцию $a_K | \Psi \rangle$. С помощью (4.19) и свойства вакуумного состояния (4.14) находим

$$a_K | \Psi \rangle = u_K a_K | \Psi \rangle + v_K a_{-K}^\dagger | \Psi \rangle = v_K a_{-K}^\dagger | \Psi \rangle. \quad (4.20)$$

Отсюда с учетом свойств эрмитового сопряжения имеем

$$\langle \Psi | a_K^\dagger a_K | \Psi \rangle = v_K^2. \quad (4.21)$$

На данном этапе наиболее существенное для нас свойство полученного результата состоит в том, что вероятность

заполнения состояния K связана с v_K . Ограничения на v_K налагаются только соотношениями (4.5) и (4.6). Поэтому мы можем рассматривать v_K при $K > 0$ как независимые переменные, а v_K при $K < 0$ и все u_K — как функции от них. Следовательно, заполнение каждого состояния происходит свободно и независимо от других, за исключением состояний K и $-K$, которые в соответствии с (4.21) и (4.5) должны быть одинаково заполненными. Именно поэтому волновая функция $|\psi\rangle$ является чрезвычайно удачной вариационной функцией.

Попутно можно получить еще один простой результат. Напомним, что распределение по импульсам дается оператором $a_K^\dagger a_K$, определяющим число частиц в состоянии K . Можно поставить вопрос о том, какова вероятность одновременного заполнения каких-либо двух состояний. Обобщение на этот случай оператора $a_K^\dagger a_K$, очевидно, имеет вид

$$a_K^\dagger a_K a_L^\dagger a_L = a_K^\dagger a_L^\dagger a_L a_K,$$

откуда следует, что вероятность одновременного заполнения состояний K и L равна

$$\langle \psi | a_K^\dagger a_L^\dagger a_L a_K | \psi \rangle = (a_L a_K \psi, a_L a_K \psi), \quad (4.22)$$

где, согласно (4.18) и (4.20),

$$a_L a_K |\psi\rangle = (u_L a_L + v_L a_{-L}^\dagger) \cdot v_K a_{-K}^\dagger |\psi\rangle = v_K v_L a_{-L}^\dagger a_{-K}^\dagger |\psi\rangle - (K \neq -L). \quad (4.23)$$

Отсюда для состояния $K \neq -L$, т. е. не образующих связанный пары, получаем результат типа Хартри

$$\langle \psi | a_K^\dagger a_L^\dagger a_L a_K | \psi \rangle = v_K^2 v_L^2 = \langle \psi | a_K^\dagger a_K | \psi \rangle \langle \psi | a_L^\dagger a_L | \psi \rangle. \quad (4.24)$$

7. Вариационная процедура

Мы полагаем теперь, что читатель уже достаточно убедился в достоинствах волновой функции БКШ. Остается лишь рассмотреть, как проводятся вариационные вычисления и какой смысл может иметь окончательный результат, если в соответствии с (4.9) эта функция не описывает фиксированное число частиц.

Напомним кратко обычный вариационный метод. Мы выбираем нормированную N -частичную волновую функцию, являющуюся собственной функцией оператора полного числа частиц N_{op} . После этого определяется выражение для энергии, которое затем минимизируется.

В данном случае с помощью волновой функции БКШ формально совсем не трудно вычислить среднюю энергию. Используя (4.9), получаем

$$E \equiv \langle \psi | H | \psi \rangle = (\prod u_k)^2 \sum_{n=0}^{\infty} \langle \varphi_{2n} | H | \varphi_{2n} \rangle, \quad (4.25)$$

ибо, как нетрудно показать, скалярные произведения волновых функций с различным числом частиц равны нулю. Однако мы видели, что в общем случае $|\psi\rangle$ не является собственным состоянием оператора числа частиц. Тем не менее мы можем ограничиться более слабым условием, а именно потребовать, чтобы среднее значение N_{op} для состояния $|\psi\rangle$ было равно N , т. е.

$$\bar{N} \equiv \langle \psi | N_{op} | \psi \rangle = N. \quad (4.26)$$

Проблема минимизации выражения (4.25) с условием (4.26) решается стандартным способом. Рассмотрим минимизацию выражения

$$E - \mu \bar{N} \equiv \langle \psi | H - \mu N_{op} | \psi \rangle \quad (4.27)$$

уже без дополнительных условий; μ — множитель Лагранжа, пока еще не определенный. Найдя величину $|\psi(\mu)\rangle$ и подставив ее в (4.26), получим уравнение для определения μ .

Но дополнительного условия (4.26) еще недостаточно для того, чтобы хоть в какой-либо мере связать вычисления, рассмотренные выше, с обычными вычислениями. Конечно, нам очень хотелось бы показать, что предлагаемое дополнительное условие обеспечивает приближенное выполнение равенства

$$N_{op} |\psi\rangle = N |\psi\rangle.$$

Для выяснения этого вопроса удобно вычислить среднеквадратичное отклонение

$$\Delta^2 N_{op} \equiv \langle \psi | N_{op}^2 | \psi \rangle - N^2 \quad (4.28)$$

и исследовать его малость.

Если среднеквадратичное отклонение мало (а мы покажем, что это так), то можно в качестве вариационной функции использовать Φ_N из разложения (4.9). Конечно, при этом возникает некоторое размывание из-за того, что выражение (4.28) не равно нулю. Это размывание проявляется в том, что в разложение войдут другие функции φ_i с i , близкими, но не равными N . При этом функции φ_i для i , сильно отличающихся от $i = N$, войдут с очень малыми весовыми множителями.

Таким образом, используемый ниже вариационный метод можно охарактеризовать следующим образом. Будем исходить

из модельного гамильтониана (4.3), предполагая, что он соответствует сверхпроводнику, и путем минимизации энергии (4.25) с учетом дополнительного условия (4.26) вычислим оптимальное значение u_K и v_K в волновой функции БКШ. Для проверки этого метода вычислим среднеквадратичное отклонение (4.28) и покажем, что оно мало. После того как будет найдено основное состояние, с помощью методов, описанных в п. 5, будут вычислены одночастичные возбуждения. Зная энергетический спектр таких возбуждений, мы сможем исследовать низкотемпературные термодинамические свойства.

Наконец, отметим, что соотношение (4.27) вводит гамильтониан

$$\mathcal{H} = H - \mu N_{op}, \quad (4.29)$$

который обычно более удобен, чем H . Переход от одного из них к другому фактически представляет собой переопределение нулевого значения энергии одночастичных возбуждений. Далее мы еще обсудим свойства гамильтониана \mathcal{H} .

§ 5. ТЕОРИЯ БКШ ДЛЯ НУЛЕВОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Запишем в явном виде гамильтониан (4.29)

$$\mathcal{H} = \sum \epsilon_K a_K^\dagger a_K + \frac{1}{2} \sum V_{KK'} a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_K, \quad (5.1)$$

где в соответствии со сказанным выше подразумевается, что суммирование членов с $V_{KK'}$ производится только по состояниям вблизи поверхности Ферми, и введено обозначение

$$\epsilon_K = \epsilon_K - \mu. \quad (5.2)$$

Первой нашей задачей является вычисление $\epsilon = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle$ и минимизация этого выражения путем нахождения оптимальных значений u_K и v_K . Получающееся при этом уравнение Эйлера и является интегральным уравнением БКШ.

1. Интегральное уравнение БКШ

Наиболее прямой путь нахождения ϵ состоит в использовании $|\psi\rangle$ в форме (4.4) и гамильтониана \mathcal{H} , определяемого соотношением (5.1). Однако мы воспользуемся каноническими преобразованиями (4.18) и (4.19) и свойством вакуумного состояния (4.14) не только потому, что такой способ, возможно, проще, но и потому, что он позволяет установить эквивалентность подхода БКШ и более позднего подхода Боголюбова [24]¹⁾ (см. также работу Валатина [197]).

¹⁾ См. также работу Н. Н. Боголюбова, Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковникова, ДАН СССР, 117, 788 (1957). — Прим. перев.

Итак, воспользуемся теоремой Вика для того, чтобы записать \mathcal{H} в форме нормального произведения относительно операторов a . Имеем

$$\begin{aligned} a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'} = & N_\alpha(a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}) + N_\alpha(a_K^\dagger \underline{a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) + \\ & + N_\alpha(a_K^\dagger \underline{a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) + N_\alpha(\underline{a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) + \\ & + N_\alpha(\underline{a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) + N_\alpha(a_K^\dagger \underline{a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) + \\ & + N_\alpha(a_K^\dagger \underline{a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) + N_\alpha(\underline{a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) + \\ & + N_\alpha(\underline{\underline{a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}}) + N_\alpha(\underline{\underline{a_K^\dagger a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}}), \end{aligned}$$

после чего можно явно вычислить все слагаемые в отдельности. Например,

$$\begin{aligned} N_\alpha(a_K^\dagger \underline{a_{-K}^\dagger a_{-K'} a_{K'}}) = & \langle \psi | (u_K \alpha_K + v_K \alpha_{-K}^\dagger) (u_{-K} \alpha_{-K} - v_{-K} \alpha_{-K}^\dagger) | \psi \rangle \times \\ & \times N[(u_K \alpha_{-K} - v_{-K} \alpha_{-K}^\dagger) (u_{-K'} \alpha_{-K'} + v_{-K'} \alpha_{-K'}^\dagger)] = \\ = & -u_K v_K \cdot (u_{-K}^2 \alpha_{-K} \alpha_{-K'} - u_K v_{-K} \alpha_{-K}^\dagger \alpha_{-K'} - \\ & - u_{-K} v_{-K} \alpha_{-K}^\dagger \alpha_{-K'} - v_{-K}^2 \alpha_{-K}^\dagger \alpha_{-K'}^\dagger). \end{aligned}$$

Аналогично можно вычислить и другие члены. Сложив их, получим

$$\mathcal{H} = \epsilon + \mathcal{H}_{11} + \mathcal{H}_{20} + \mathcal{H}_{33}, \quad (5.3)$$

где

$$\epsilon = \sum \epsilon_K v_K^2 + \frac{1}{2} \sum V_{KK'} u_K v_K u_{K'} v_{K'}, \quad (5.4)$$

$$\mathcal{H}_{11} = \sum \epsilon_K (u_K^2 - v_K^2) a_K^\dagger a_K - 2 \sum V_{KK'} u_K v_K u_{K'} v_{K'} a_K^\dagger a_K, \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{20} = & \sum \epsilon_K u_K v_K (a_K^\dagger a_{-K}^\dagger + a_{-K} a_K) + \\ & + \frac{1}{2} \sum V_{KK'} (u_K^2 - v_K^2) u_{K'} v_{K'} (a_K^\dagger a_{-K}^\dagger + a_{-K} a_K), \quad (5.6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{33} = & \sum \{ \text{члены типа } a^\dagger a^\dagger a^\dagger a^\dagger, a^\dagger a^\dagger a^\dagger a, a^\dagger a^\dagger a a, \\ & a^\dagger a a a, a a a a \text{ с различными весовыми множителями} \}. \quad (5.7) \end{aligned}$$

Выражение (5.7) возникает из приведенного выше члена, в котором нет ни одного спаривания, а ϵ соответствует трем полностью спаренным членам. [В (5.4) опущено несколько слагаемых типа $V_{KK'} v_K^4$, которые в Ω раз меньше, чем $\epsilon_K v_K^2$.]

Займемся теперь минимизацией величины ϵ , записанной в форме (5.4), с учетом условий (4.5) и (4.6). Последние

автоматически удовлетворяются при подстановке

$$u_K = \cos \theta_K, \quad v_K = \sin \theta_K, \quad \theta_K = -\theta_{-K} = \theta_k. \quad (5.8)$$

Теперь можно представить (5.4) в виде

$$\epsilon = \sum \epsilon_K \sin^2 \theta_K + \frac{1}{8} \sum V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'}, \quad (5.9)$$

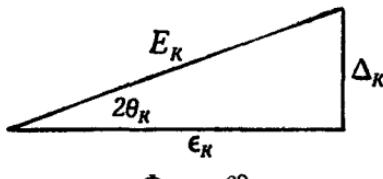
откуда находим

$$\delta \epsilon = \sum \epsilon_K \sin 2\theta_K \delta \theta_K + \frac{1}{2} \sum V_{KK'} \cos 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} \delta \theta_K. \quad (5.10)$$

Антисимметрия θ_K не вносит осложнений, поскольку, считая приращения у слагаемых в правой части (5.10) независимыми, получаем интегральное уравнение

$$\operatorname{tg} 2\theta_K = -\frac{1}{2\epsilon_K} \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_{K'}, \quad (5.11)$$

решение которого автоматически имеет правильную симметрию. Это обеспечивается свойством $V_{K-K'} = 0$, отражающим условие сохранения спина. Действительно, легко видеть, что если θ_K^0 ($K > 0$) является решением, то $-\theta_{-K}^0$ ($K < 0$) также является решением.



Фиг. 69

Имеются также и другие способы записи уравнения (5.11). Например, его можно записать в виде

$$\Delta_K = -\frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \frac{\Delta_{K'}}{E_{K'}}, \quad (5.12)$$

где

$$\operatorname{tg} 2\theta_K = \frac{\Delta_K}{\epsilon_K} \quad (5.13)$$

и

$$E_K = \sqrt{(\epsilon_K^2 + \Delta_K^2)}. \quad (5.14)$$

Связь между различными величинами ясна из фиг. 69. Если ввести обозначение

$$\epsilon_K = \epsilon_{-K} = \epsilon_k, \quad (5.15)$$

то из антисимметрии θ_K следует антисимметрия величины

$$\Delta_K = -\Delta_{-K} = \Delta_k. \quad (5.16)$$

Наконец, интегральное уравнение можно записать в бесспиновой форме. Полагая

$$V_{KK'} = V_{-K-K'} = V_{kk'}, \quad V_{K-K'} = V_{-KK'} = 0 \quad (5.17)$$

перепишем (5.11) в виде

$$\operatorname{tg} 2\theta_k = -\frac{1}{-2\epsilon_k} \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'}. \quad (5.18)$$

Из (5.12) следует, что $\Delta_K = 0$ всегда будет решением. Его можно записать как $u_K v_K = 0$, что соответствует нормальной поверхности Ферми. Однако характерным свойством сверхпроводников является наличие решений с более низкими значениями энергии, которые мы теперь исследуем.

2. Решение для усредненного потенциала

Для удобства вычислений запишем взаимодействие, приводящее к сверхпроводимости, в явном виде

$$V_{KK'} = \begin{cases} -V\Omega^{-1}, & \text{если в состояниях } K, K' \text{ спины} \\ & \text{одинаковы и } |\epsilon_K|, |\epsilon_{K'}| < \delta, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (5.19)$$

Его можно сравнить с взаимодействием (3.6), которое мы использовали, когда первый раз ввели представление о куперовских парах. Многие из сделанных там замечаний применимы и для нашего случая, и мы не будем повторять их. Но один момент следует обсудить особо. Величина μ пока является просто множителем Лагранжа. Что же дает нам основание считать, что условие $|\epsilon_k| < \delta$ действительно определяет оболочку, лежащую вблизи поверхности Ферми? Ответ состоит в том, что простые вычисления для невзаимодействующих частиц дают $\mu = E_f$. Если энергия взаимодействия между частицами составляет лишь малую часть полной энергии (что справедливо в рассматриваемом случае), то μ очень незначительно отличается от E_f , поэтому условие $|\epsilon_k| < \delta$ определяет оболочку, покрывающую поверхность Ферми. Такой выбор энергетической оболочки позволяет обойти математические трудности, не затрагивая описания физических свойств системы.

Подставляя (5.19) в (5.12), получаем

$$\Delta_K = 0 \quad (|\epsilon_K| > \delta) \quad (5.20)$$

и

$$\Delta_K = \frac{V}{2} \frac{1}{\Omega} \sum_{|\epsilon_{K'}| < \delta} \frac{\Delta_{K'}}{E_{K'}} \quad (|\epsilon_K| < \delta), \quad (5.21)$$

где спины в состояниях K' , K одинаковы. Это уравнение можно решить следующим образом. Так как $\Delta_K = \Delta$ не зависит от K , сокращаем обе части на Δ (мы ищем нетривиальное решение $\Delta \neq 0$); тогда получаем

$$\frac{2}{V} = \frac{1}{\Omega} \sum_{|\epsilon_K| < \delta} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_K^2 + \Delta^2}}, \quad (5.22)$$

где суммирование в правой части проводится по однократно заполненным состояниям. Повторяя рассуждения Купера [см. (3.8) и (3.10)], получаем соотношение

$$\frac{2}{V} = \rho \int_{-\delta}^{\delta} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}; \quad (5.23)$$

непосредственное интегрирование дает

$$\Delta = \delta \operatorname{csch} \frac{1}{\rho V} \sim 2\delta e^{-1/\rho V}. \quad (5.24)$$

Симметризуя должным образом решение, получаем

$$\begin{aligned} \Delta_K &\quad (K > 0), \\ -\Delta_{-K} &\quad (K < 0), \end{aligned} \quad (5.25)$$

где $\Delta_K = 0$ для $|\epsilon_K| > \delta$ и $\Delta_K = \Delta$ в соответствии с (5.24) при $|\epsilon_K| < \delta$. Ниже мы увидим, что решение (5.25) соответствует меньшей энергии, чем решение в форме детерминанта из плоских волн. В заключение покажем, что полученное решение приближенно можно считать собственной функцией оператора числа частиц, для чего вычислим среднеквадратичное отклонение (4.28).

С помощью соотношений (4.18) и (4.19) выразим оператор числа частиц через операторы α :

$$N_{op} = \sum_K [(u_K^2 - v_K^2) \alpha_K^\dagger \alpha_K + u_K v_K (\alpha_K^\dagger \alpha_{-K}^\dagger + \alpha_{-K} \alpha_K) + v_K^2]; \quad (5.26)$$

тогда

$$\langle \Psi | N_{op} | \Psi \rangle = \sum_K v_K^2. \quad (5.27)$$

Приравнивая это выражение N , получаем уравнение для определения μ . Ненамного сложнее вычислить среднее значение N_{op}^2 :

$$\langle \psi | N_{op}^2 | \psi \rangle = \sum_K u_K^2 v_K^2 + \sum_{K,L} v_K^2 v_L^2, \quad (5.28)$$

откуда

$$\Delta^2 N_{op} \equiv \langle \psi | N_{op}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | N_{op} | \psi \rangle^2 = \sum_K u_K^2 v_K^2. \quad (5.29)$$

Из (5.8) и фиг. 69 получаем полезные соотношения

$$2u_K v_K = \frac{\Delta_K}{E_K}, \quad u_K^2 - v_K^2 = \frac{\epsilon_K}{E_K}; \quad (5.30)$$

используя первое из них, находим

$$\Delta^2 N_{op} = \frac{1}{4} \sum_K \frac{\Delta_K^2}{E_K^2} = \frac{1}{4} \Omega (2\rho) \int_{-\delta}^{\delta} \frac{\Delta^2}{\epsilon^2 + \Delta^2} d\epsilon = \Omega \rho \Delta \operatorname{arctg} \frac{\delta}{\Delta}. \quad (5.31)$$

Отметим, в частности, формально строгий результат

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\Delta^2 N_{op}}{N^2} = 0, \quad (5.32)$$

после чего можно повторить замечания, сделанные в п. 7.

3. Свойства основного состояния

1) Полная энергия. При использовании условия (5.11) выражение для полной энергии (5.9) приводится к виду

$$\epsilon = \sum_K \epsilon_K \left(\sin^2 \theta_K - \frac{1}{4} \sin 2\theta_K \operatorname{tg} 2\theta_K \right). \quad (5.33)$$

Используя решение (5.25), соответствующее потенциалу (5.19), после нескольких громоздких, но прямых вычислений получаем для случая слабого взаимодействия

$$\epsilon(\delta) = \epsilon(0) - \frac{1}{2} \Omega \rho \Delta^2, \quad (5.34)$$

откуда видно, что энергия нашего решения меньше энергии $\epsilon(0)$ состояния в виде детерминанта из плоских волн. Так как Δ обычно имеет значение порядка 10^{-4} эв, порядок полной энергии совпадает с предсказанным в § 2, п. 4.

2) Изотопический эффект. Интересно отметить, что здесь мы имеем пример изотопического эффекта. Величина критиче-

ского поля H_{c0} , разрушающего сверхпроводимость, определяется соотношением [см. (2.2)]

$$\frac{H_{c0}^2}{8\pi} = \frac{\epsilon(0) - \epsilon(\delta)}{\Omega} = \frac{1}{2} \rho \Delta^2 = 2\rho \delta^2 e^{-2/\rho V}. \quad (5.35)$$

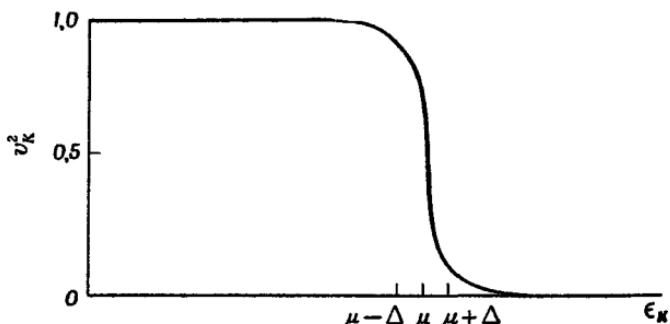
Обозначив массу иона через M и положив

$$\delta = \hbar \omega \sim \frac{1}{M^{1/2}}, \quad (5.36)$$

получим соотношение

$$H_{c0} M^{1/2} = \text{const.} \quad (5.37)$$

Именно такой характер, как (5.36), имеет зависимость частоты осциллятора от его массы, которая совершенно естественно возникает в теории колебаний решетки [см., например, (8.2.10)].



Фиг. 70. Распределение по энергии (импульсу).

3) *Распределение по импульсам.* Определенный интерес представляет точное выражение для величины размытия поверхности Ферми, обусловленного взаимодействием. Она определяется функцией распределения по импульсам (4.21). С помощью (5.8) и фиг. 69 находим соотношение

$$\langle \psi | a_K^\dagger a_K | \psi \rangle = v_K^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_K}{E_K} \right) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_K - \mu}{V[(\epsilon_K - \mu)^2 + \Delta_K^2]} \right), \quad (5.38)$$

графическое изображение которого приведено на фиг. 70.

Здесь следует отметить непрерывность при переходе через поверхность Ферми в отличие от разрыва, имеющего место в случае электронов, между которыми действуют только кулоновские силы (см. гл. 5).

4. Возбужденные состояния

1) Одночастичные возбуждения. В соответствии с предыдущим рассмотрением (см. фиг. 67 и ее интерпретацию) энергия возбуждения простейшего типа возбужденного состояния $\alpha_K^\dagger \alpha_{K'}^\dagger |\psi\rangle$ равна

$$(\alpha_K^\dagger \alpha_{K'}^\dagger \psi, \mathcal{H} \alpha_K^\dagger \alpha_{K'}^\dagger \psi) - (\psi, \mathcal{H} \psi). \quad (5.39)$$

В качестве первого этапа вычисления энергии (5.39) найдем более простое выражение для гамильтонiana \mathcal{H} , описываемого соотношениями (5.3) – (5.7), с учетом уравнения (5.11).

Прежде всего необходимо отметить, что член \mathcal{H}_{20} тождественно равен нулю. Этот факт устанавливает принципиальную эквивалентность методов БКШ и Боголюбова. В методе Боголюбова используется теория возмущений, причем $\mathcal{H}_{\text{вз}}$ в (5.3) рассматривается как возмущение. Если член \mathcal{H}_{20} не равен нулю, то энергетические знаменатели обращаются в нуль. Чтобы избежать появления таких „опасных“ знаменателей, необходимо положить $\mathcal{H}_{20} = 0$, что эквивалентно минимизации энергии в методе БКШ.

Далее, член \mathcal{H}_{11} нетрудно представить в виде

$$\mathcal{H}_{11} = \sum_K E_K \alpha_K^\dagger \alpha_K, \quad (5.40)$$

где $E_K = \sqrt{(\epsilon_K^2 + \Delta_K^2)}$ в соответствии с (5.14). Таким образом,

$$\mathcal{H} = \epsilon + \mathcal{H}_{11} + \mathcal{H}_{\text{вз}}, \quad (5.41)$$

где \mathcal{H}_{11} определяется соотношением (5.40), а энергию возбуждения (5.39) легко привести к виду

$$(\alpha_K^\dagger \alpha_{K'}^\dagger \psi, [\mathcal{H}_{11} + \mathcal{H}_{\text{вз}}] \alpha_K^\dagger \alpha_{K'}^\dagger \psi) = E_K + E_{K'} + (\alpha_K^\dagger \alpha_{K'}^\dagger \psi, \mathcal{H}_{\text{вз}} \alpha_K^\dagger \alpha_{K'}^\dagger \psi). \quad (5.42)$$

Предположим на время, что последний член обращается в нуль, когда K и K' приближаются к поверхности Ферми (K сверху, а K' снизу), тогда оказывается (поскольку E_K и $E_{K'}$ стремятся при этом к Δ), что между основным состоянием и ближайшим к нему возбужденным состоянием существует энергетическая щель шириной 2Δ , как мы и ожидали.

Теперь остается вычислить последний член в (5.42). С помощью гамильтонiana (5.1) и преобразований (4.18) и (4.19) нетрудно получить явное выражение для $\mathcal{H}_{\text{вз}}$ через операторы α , после чего можно приступить к вычислению его среднего значения. Однако излагаемый ниже метод оказывается значительно проще.

Начнем с выяснения того, какие члены из $\mathcal{H}_{\text{вз}}$ могут давать в $(a_K^\dagger a_K^\dagger \psi, \mathcal{H}_{\text{вз}} a_K^\dagger a_K^\dagger \psi)$ вклады, отличные от нуля. Из требования сохранения числа частиц вытекает, что они должны быть пропорциональны операторам типа $a_P^\dagger a_Q^\dagger a_R a_S$. Но мы не ограничимся этим и пойдем дальше. Если $(P, Q), (R, S)$ и (K, K') не равны между собой (с достаточной точностью), то среднее значение такого оператора будет равно нулю. Следовательно, остается только один оператор вышеназванного типа, а именно $a_K^\dagger a_K a_{K'}^\dagger a_{K'}$. Если теперь рассмотреть члены с потенциальной энергией в (5.1), выраженные через операторы a , имея в виду, что K' лежит ниже, а K — выше поверхности Ферми, то мы обнаружим очень немного членов, дающих вклады. Их полная сумма равна

$$-4V_{KK'} u_K v_K u_{K'} v_{K'} a_K^\dagger a_K a_{K'}^\dagger a_{K'} \quad (5.43)$$

и, следовательно,

$$(a_K^\dagger a_K^\dagger \psi, \mathcal{H}_{\text{вз}} a_K^\dagger a_K^\dagger \psi) = 4V_{KK'} u_K v_K u_{K'} v_{K'} = V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'}. \quad (5.44)$$

Теперь мы убеждаемся, что действительно имели право пренебречь этим членом в (5.42) для K, K' , лежащих вблизи поверхности Ферми, так как в этом случае

$$V_{KK'} = O(\Omega^{-1}),$$

в то время как E_K и $E_{K'}$ имеют порядок единицы.

Наконец, отметим, что оператор полного импульса имеет вид

$$\sum k a_K^\dagger a_K = \sum k a_{K'}^\dagger a_{K'}, \quad (5.45)$$

где суммирование проводится по всем K . Это соотношение чрезвычайно важно, так как оно свидетельствует о том, что K является не просто удобным параметром, позволяющим поставить в соответствие системе аналогичную систему без взаимодействия, но что K представляет импульс и спин квазичастичного возбуждения. Сходная ситуация будет подробнее рассмотрена в гл. 8, § 3, п. 7.

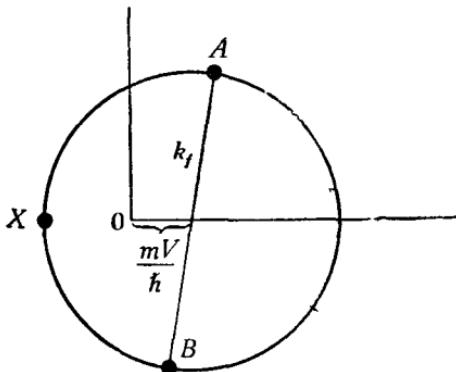
2) *Токовые состояния.* После того как показано существование энергетической щели, нетрудно понять метастабильность токонесущих состояний. На фиг. 71 в k -пространстве (см. фиг. 67 и ее обсуждение) изображено такое состояние; здесь V — дрейфовая скорость, m — масса электрона. Сильно коррелированным парам соответствуют диаметрально противоположные точки A и B вблизи поверхности Ферми. Если по какой-либо причине связь между парами нарушается, то при практически осуществимых значениях дрейфовой скорости V рассматриваемой паре энергетически выгодней вернуться в коррелированное состояние,

чем перейти в состояние с меньшей кинетической энергией в окрестности точки X .

Дадим более строгое доказательство сделанного утверждения. Уменьшение кинетической энергии при переходе из A и B в окрестность точки X равно

$$\frac{\hbar^2}{2m} OA^2 + \frac{\hbar^2}{2m} OB^2 - 2 \frac{\hbar^2}{2m} OX^2 = 2\hbar k_f V. \quad (5.46)$$

Этот результат не зависит от конкретного выбора пары. С другой стороны, увеличение энергии системы при разрушении пары



Фиг. 71. Токовое состояние.

равно 2Δ , следовательно, спаренное состояние остается энергетически более выгодным при условии

$$V < \frac{\Delta}{\hbar k_f} \sim \frac{10^{-4} \cdot 10^{-12}}{10^{-19}} \text{ см/сек} = 10^3 \text{ см/сек}; \quad (5.47)$$

здесь использованы характерные значения Δ и k_f .

§ 6. ТЕОРИЯ БКШ ДЛЯ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУР

Сначала кратко перечислим те положения теории при нулевой температуре, которые будут существенны для нас в дальнейшем. Гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \epsilon + \sum_K E_K \alpha_K^+ \alpha_K + \mathcal{H}_{\text{вз.}} \quad (6.1)$$

Энергия основного состояния, согласно (5.9), определяется следующим образом:

$$\epsilon = \sum_K \epsilon_K \sin^2 \theta_K + \frac{1}{8} \sum_{KK'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'}, \quad (6.2)$$

а E_K в соответствии с (5.5) записывается в форме

$$E_K = \epsilon_K \cos 2\theta_K - \frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'}. \quad (6.3)$$

Волновая функция основного состояния $|\psi\rangle$ [см. (4.4)] является вакуумным состоянием для операторов a , а одночастичные возбуждения являются фермионами типа $a_K^\dagger a_{K'}^\dagger |\psi\rangle$, где один из индексов, скажем K , лежит выше поверхности Ферми, а другой — ниже.

В k -пространстве этому соответствует ситуация типа изображенной на фиг. 68, μ . Среднее значение гамильтонiana $\mathcal{H}_{\text{вз}}$ относительно такого возбужденного состояния в соответствии с (5.44) равно

$$(a_K^\dagger a_{K'}^\dagger \psi, \mathcal{H}_{\text{вз}} a_K^\dagger a_{K'}^\dagger \psi) = V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'}. \quad (6.4)$$

Необходимо отметить, что при выводе этих формул не использовалось интегральное уравнение БКШ (5.11). Это очень важно, так как в температурной теории применяется более общий прием, основанный на минимизации свободной энергии.

1. Интегральное уравнение БКШ при конечных температурах

В соответствии с идеями, развитыми в гл. 3, удобно рассматривать основное состояние БКШ $|\psi\rangle$ как вакуумное состояние, из которого происходит рождение пар фермионов, как изображено на фиг. 68, a . В общем случае возбужденное состояние состоит из многих таких пар, а при любой конечной температуре T состояние системы задается в форме вероятностного распределения по всем возможным возбужденным состояниям. Предположим, что при температуре T вероятность заполнения состояния K (в соответствующем k -пространстве) есть f_K .

Нашей ближайшей целью является вывод выражения для свободной энергии Гельмгольца

$$F = U - TS, \quad (6.5)$$

где U — внутренняя энергия, S — энтропия. В случае фермионов выражение для энтропии имеет обычный вид (см., например, [205])

$$S = -k_B \sum_K \{f_K \ln f_K + (1 - f_K) \ln (1 - f_K)\}. \quad (6.6)$$

Следовательно, нам остается вычислить внутреннюю энергию U .

Эта задача решается путем добавления соответствующих весовых множителей к различным вкладам, определяемым соотношениями (6.2) – (6.4). В частности, полная кинетическая энергия равна сумме кинетической энергии основного состояния и кинетической энергии рожденных фермионов, т. е.

$$\text{Кинетическая энергия} = \sum_K \epsilon_K \sin^2 \theta_K + \sum_K \epsilon_K \cos 2\theta_K f_K. \quad (6.7)$$

Аналогично, полная потенциальная энергия слагается из трех компонент, обусловленных вакуум-вакуумным, вакуум-фермионным и фермион-фермионным взаимодействиями. Следовательно, можно записать

$$\begin{aligned} \text{Потенциальная энергия} = & \frac{1}{8} \sum_{KK'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} + \\ & + \sum_K f_K \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} \right\} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{KK'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} f_{K'} f_{K''}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Складывая (6.7) и (6.8), после небольших преобразований получаем полную внутреннюю энергию

$$\begin{aligned} U = & \frac{1}{2} \sum_K \epsilon_K - \frac{1}{2} \sum_K \epsilon_K (1 - 2f_K) \cos 2\theta_K + \\ & + \frac{1}{8} \sum_{KK'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} (1 - 2f_K) (1 - 2f_{K'}). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Последующие вычисления производятся так же, как и в случае нулевой температуры. Будем варьировать F по переменным θ_K и f_K , учитывая выражения (6.6) и (6.9) для S и U . Варьируя сначала по θ_K , непосредственно получаем

$$\operatorname{tg} 2\theta_K = - \frac{1}{2\epsilon_K} \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_{K'} (1 - 2f_{K'}). \quad (6.10)$$

Вводя обозначения (фиг. 72)

$$\operatorname{tg} 2\theta_K = \frac{\Delta_K}{\epsilon_K}, \quad E_K = \sqrt{(\epsilon_K^2 + \Delta_K^2)}, \quad (6.11)$$

можно записать (6.10) в другой форме:

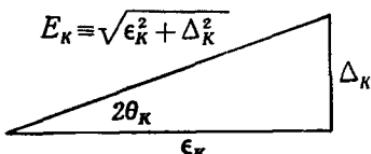
$$\Delta_K = - \frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \frac{\Delta_{K'}}{E_{K'}} (1 - 2f_{K'}). \quad (6.12)$$

Необходимо отметить, что величина E_K , определяемая соотношением (6.11), отличается от величины \bar{E}_K , использованной в § 5 (см. ниже).

С другой стороны, вариация по f_K дает

$$\epsilon_K \cos 2\theta_K - \frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} (1 - 2f_{K'}) + \frac{1}{\beta} \ln \frac{f_K}{1-f_K} = 0, \quad (6.13)$$

где использовано обозначение $\beta = 1/k_B T$. Уравнения Эйлера (6.10) и (6.13) можно привести к более удобной и прозрачной



Фиг. 72.

форме, исключая явную зависимость от $V_{KK'}$. Подстановка (6.10) в (6.13) дает

$$-\frac{1}{\beta} \ln \frac{f_K}{1-f_K} = \epsilon_K \cos 2\theta_K + \sin 2\theta_K (\epsilon_K \operatorname{tg} 2\theta_K) = \frac{\epsilon_K}{\cos 2\theta_K} = E_K, \quad (6.14)$$

откуда

$$f_K = \frac{1}{e^{\beta E_K} + 1}. \quad (6.15)$$

Подставляя это соотношение в (6.12), получаем интегральное уравнение БКШ для конечных температур

$$\Delta_K = -\frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \frac{\Delta_{K'}}{E_{K'}} \operatorname{th} \frac{1}{2} \beta E_{K'}. \quad (6.16)$$

Функция f_K , определяемая соотношением (6.15), имеет вид функции Ферми–Дирака. Ее график приведен на фиг. 73. Если $\Delta_K = 0$, то $E_K = \epsilon_K$, и мы получаем зависящее от температуры распределение, соответствующее свободным частицам, но не в обычной форме, а в представлении частиц – дырок. Если $T \rightarrow 0$, то площадь, ограниченная кривой, стремится к нулю, что соответствует полному отсутствию и частиц и дырок, как это и должно быть в основном состоянии.

Строго говоря, величины Δ_K , θ_K и E_K следовало бы отмечать еще индексом T , так как они зависят от температуры; этот индекс опущен лишь для удобства записи. При $T = 0$ указанные величины принимают значения, полученные для них в § 5.

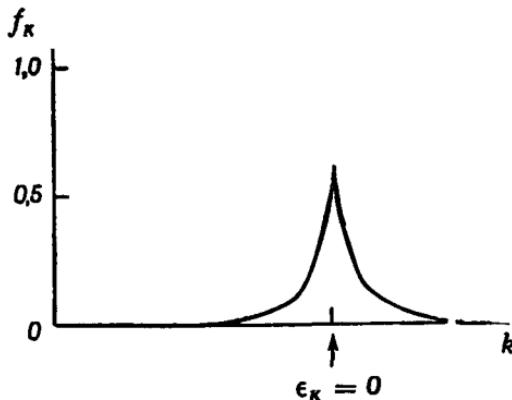
Наконец, мы замечаем, что E_K и Δ_K играют в рассматриваемой теории такую же роль, как и ранее. Так, энергия возбуждения фермиона с индексом K в системе взаимодействующих частиц при конечной температуре равна

$$\left\{ \epsilon_K \cos 2\theta_K - \frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} \right\} + \\ + \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} f_{K'}, \quad (6.17)$$

где использованы соотношения (6.3) и (6.4). Это выражение можно упростить и привести к виду

$$\epsilon_K \cos 2\theta_K - \frac{1}{2} \sum_{K'} V_{KK'} \sin 2\theta_K \sin 2\theta_{K'} (1 - 2f_{K'}) = E_K(\beta); \quad (6.18)$$

последнее равенство получено с помощью (6.10). Таким образом, $E_K(T)$ представляет собой энергию, необходимую для рожде-



Фиг. 73. Функция распределения частиц — дырок.

ния фермиона, откуда в свою очередь следует, что энергия, необходимая для рождения пары частица — дырка на поверхности Ферми, точно равна $2\Delta_K(T)$, где значение индекса K берется на поверхности Ферми.

2. Решение для усредненного потенциала

Решим еще раз интегральное уравнение для частного случая потенциала, имеющего вид

$$V_{KK'} = \begin{cases} -V\Omega^{-1}, & \text{если спины в состояниях } K \text{ и } K' \\ & \text{одинаковы и } |\epsilon_K|, |\epsilon_{K'}| < \delta, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (6.19)$$

Подставляя (6.19) в (6.16), получаем, как и раньше,

$$\Delta_K = 0 \quad (|\epsilon_K| > \delta), \quad \Delta_K = \Delta \quad (|\epsilon_K| < \delta), \quad (6.20)$$

где величина Δ не зависит от K и равна или нулю (нормальное решение), или определяется из уравнения

$$\frac{2}{V} = \frac{1}{\Omega} \sum_{|\epsilon_{K'}| < \delta} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{K'}^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{1}{2} \beta \sqrt{\epsilon_{K'}^2 + \Delta^2} = \\ = \rho \int_{-\delta}^{\delta} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{1}{2} \beta \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}, \quad (6.21)$$

где суммирование проводится по однократно заполненным состояниям.

Необходимо отметить следующее. При $\beta \rightarrow \infty$ мы возвращаемся к случаю нулевой температуры; при этом, как мы видели, можно решить уравнение (6.21) и получить ненулевое значение (5.24) для Δ . С другой стороны, если при любом значении Δ уменьшать β , то правая часть (6.21) монотонно убывает до тех пор, пока, наконец, β не достигнет такого малого значения, при котором уравнение (6.21) уже не может иметь ненулевого решения; тогда необходимо пользоваться только нормальным нулевым решением. Критическую температуру, выше которой сверхпроводимость невозможна, можно определить, приравнивая в (6.21) $\Delta(\beta) = 0$ при $\beta = \beta_c$. При этом получаем

$$\frac{1}{\rho V} = \int_0^{\delta} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \operatorname{th} \frac{1}{2} \beta_c \epsilon = \int_0^{\beta_c \delta} \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{1}{2} x. \quad (6.22)$$

Последняя величина зависит только от параметра $\beta_c \delta$, который для сверхпроводников велик. Уравнение (6.22) можно решить для больших $\beta_c \delta$, что дает для критической температуры (см. приложение VIII)

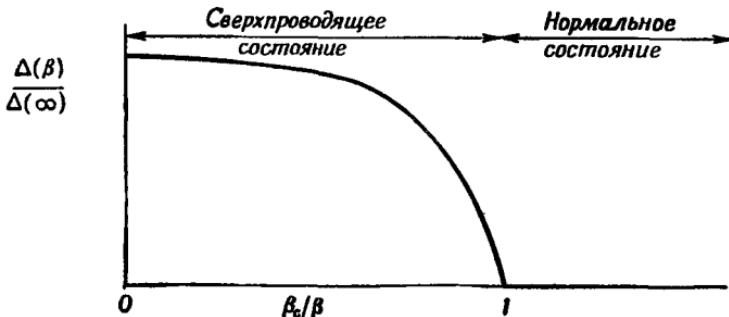
$$\frac{1}{\beta_c} = 1,14 \delta e^{-1/\rho V}. \quad (6.23)$$

В общем случае в пределе $\beta_c \delta \gg 1$ можно построить единый для всех сверхпроводников график зависимости $\Delta(\beta)/\Delta(\infty)$ от β_c/β , изображенный на фиг. 74 (подробности см. в приложении VIII). Кривая имеет вид, типичный для кооперативных явлений. Качественно уменьшение энергии взаимодействия можно объяснить тем, что в результате теплового рождения частицы K из числа состояний, которые могут породить купровскую пару, исключаются состояния K и $-K$.

Обращаясь к соотношению (6.23), можно заметить некоторые интересные закономерности. Прежде всего, полагая $\delta = \hbar\omega$, получаем изотопический эффект в виде

$$\beta_c\omega = \text{const.} \quad (6.24)$$

Кроме того, воспользовавшись формулой (5.24), соответствующей случаю нулевой температуры и слабого взаимодействия, нахо-



Фиг. 74. Зависимость $\Delta(\beta)/\Delta(\infty)$ от β_c/β

дим универсальное соотношение, имеющее место для всех сверхпроводников в приближении теории БКШ:

$$\frac{2\Delta(\infty)}{k_B T_c} = 3,52, \quad (6.25)$$

а с помощью формулы (5.35), определяющей критическое поле H_{c0} при нулевой температуре, получаем еще одно универсальное отношение

$$\frac{\gamma T_c^2}{H_{c0}^2} = 0,17, \quad (6.26)$$

где $\gamma = (2/3)\pi^2\rho k_B^2$ — предельное значение при нулевой температуре производной dC_v/dT для соответствующего нормального электронного газа. Эти результаты были бегло качественно рассмотрены при предварительном обсуждении проблемы в § 2.

3. Критическое поле и теплоемкость

Свободную энергию (6.5) легко вычислить с помощью (6.20); аналогичным образом можно исследовать и другие термодинамические свойства. Например, таким путем получена кривая зависимости критического поля от температуры, изображенная на фиг. 62. Подробно с ее расчетом читатель может ознакомиться по оригинальной работе [11].

Рассмотрим теперь теплоемкость C , которую можно записать в форме

$$C = T \frac{d}{dT} \left(\frac{S}{\Omega} \right) = - \frac{\beta}{\Omega} \frac{dS}{d\beta}. \quad (6.27)$$

С помощью формулы (6.6) для энтропии S с учетом (6.15) и (6.11) это соотношение можно переписать в виде

$$C = \frac{k_B \beta^2}{\Omega} \sum_K f_K (1 - f_K) \left[E_K^2 + \frac{\beta}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \Delta_K^2 \right]. \quad (6.28)$$

Вклад первого члена в квадратных скобках является непрерывной функцией от температуры при любых значениях последней. При температуре выше критической только этот вклад отличен от нуля, ибо щель Δ_K тождественно равна нулю. Наоборот, второй член испытывает скачок при критической температуре (см. фиг. 74). Уменьшение теплоемкости при переходе из сверхпроводящего состояния в нормальное равно

$$\frac{k_B \beta_c^3}{2\Omega} \sum_K \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \Delta_K^2 \right)_{\beta=\beta_c} \sim 2,43 \gamma T_c. \quad (6.29)$$

Таким образом, мы объяснили основные свойства кривой на фиг. 61. Более подробное исследование показывает, что фактически соотношение (2.1) выполняется при условии $2,5 < T_c/T < 6$.

§ 7. КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ И КВАНТОВАНИЕ ПОТОКА

До сих пор мы преимущественно занимались исследованием основного состояния сверхпроводников и возбужденных состояний, возникающих при одночастичных возбуждениях.

Теперь нам хотелось бы подчеркнуть, что в сверхпроводниках наряду с одночастичными существуют и коллективные возбуждения. Правда, они не влияют на свойства сверхпроводников, подробно разобранные выше, тем не менее теперь хорошо известно, что для построения любой градиентно инвариантной теории электромагнитных свойств сверхпроводников необходимо предварительно исследовать коллективные возбуждения. Эти вопросы представляют собой самостоятельную область, рассмотрение которой уело бы нас слишком далеко от основной темы книги. Поэтому нам придется ограничиться ссылками на работы Андерсона [6], Рикайзена [172] и Прэнджа [166], содержащие подробное изложение указанных вопросов.

Мы покажем, однако, что эффект Мейсснера есть следствие квантования магнитного потока. Существование кванта потока,

зависящего, как мы увидим, от полного заряда куперовской пары, является поразительным подтверждением основной идеи теории БКШ.

Для выполнения этой программы нам нужно построить выражения для свободной энергии F_n и F_s как функции потока Φ соответственно для нормального и сверхпроводящего состояния. Затем необходимо ввести дополнительное условие

$$\frac{\partial F_s}{\partial \Phi} = 0,$$

отражающее наличие эффекта Мейсснера и позволяющее различать состояния системы.

Для этого сначала вычислим энергетические уровни независимых электронов в полом цилиндре (эта форма выбрана для упрощения вычислений). При этом получаем [38]

$$E_n = \frac{1}{2m} \left[p_r^2 + p_z^2 + \frac{\hbar^2}{r^2} \left(n + \frac{e}{ch} \Phi \right)^2 \right] \quad (7.1)$$

в радиальном и z -направлении, где p_r и p_z — компоненты импульса, Φ — поток, n — целое число.

Если теперь вычислить статистическую сумму и свободную энергию, то окажется, что они не зависят от Φ . Однако до сих пор мы не учитывали основного свойства сверхпроводящего состояния, а именно спаривания электронов. Если теперь при рассмотрении пользоваться энергетическим спектром этих пар, то оказывается, что средняя энергия состояний n и $-n$ возрастает во внешнем поле на величину, пропорциональную Φ^2 . Тогда свободная энергия, вычисленная с помощью статистической суммы, также увеличивается пропорционально Φ^2 от значения, соответствующего $\Phi = 0$. Такое поведение сверхпроводника совершенно отлично от того, что мы наблюдаем у нормального металла. Нетрудно показать, что подобное спаривание состояний n и $-n$ энергетически более выгодно в том случае, когда значение потока Φ близко к целому кратному (положительному или отрицательному) величины ch/e . Во всяком случае при отклонении потока от величины, кратной ch/e , свободная энергия увеличивается.

Более осторожно следует подходить к случаям, когда поток Φ равен $1/2(ch/e)$ или $(m + 1/2)(ch/e)$. При этом член $n + (e/ch)\Phi$ в (7.1) равен $n + 1/2$, и возможно спаривание электронов, находящихся в состоянии $n = 0$ и $n = -1$ и т. д. Энергия на одну частицу остается такой же, как и при $\Phi = 0$, но возрастает при удалении от точек $(m + 1/2)(ch/e)$. На этот раз ее увеличение (для $m = 0$) пропорционально $(\Phi - 1/2(ch/e))^2$. Таким образом, свободная энергия минимальна относительно Φ при значениях Φ ,

кратных $ch/2e$. Следовательно, существование эффекта Мейсснера указывает на квантование потока, квант которого равен $ch/2e$.

Эти рассуждения не учитывают пространственной зависимости волновой функции пары БКШ в нулевом магнитном поле. Если ее учесть, то оказывается, что квант потока несколько меньше $ch/2e$.

§ 8. ТЕОРИЯ АНДЕРСОНА ДЛЯ „ГРЯЗНЫХ“ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

В рассмотренной выше теории сверхпроводимости учитывалось только взаимодействие между электронами и решеткой. Конечно, фактически во всех сверхпроводниках содержатся примеси, которые ограничивают длину свободного пробега электронов. На первый взгляд может показаться, что в том случае, когда длина свободного пробега становится слишком малой, неопределенность энергии электрона будет сравнимой с шириной энергетической щели или превышать ее, а это приведет к исчезновению сверхпроводящих свойств.

Экспериментально такой факт не был обнаружен. Еще более удивительно, что температура перехода в сверхпроводящее состояние не слишком сильно зависит от концентрации примесей. Разработанная Андерсоном [7] теория так называемых „грязных“ сверхпроводников позволяет объяснить эти свойства.

Отправным пунктом теории является построение одноэлектронных собственных функций при наличии центров рассеяния. Если обозначить полный набор блоховских функций в чистом сверхпроводнике через $\Phi_{\mathbf{k}}$, то собственные функции при наличии примесей можно формально записать в виде разложения

$$\Psi_n = \sum A_{n\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}. \quad (8.1)$$

Если блоховские функции нормированы, то для нормирования волновой функции Ψ_n необходимо потребовать выполнения условия

$$\sum_{\mathbf{k}} A_{n\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (8.2)$$

Далее, в случае немагнитных примесей, когда имеет место симметрия относительно обращения времени, волновая функция

$$\Psi_{-n} = \sum A_{n\mathbf{k}}^* \Phi_{-\mathbf{k}} \quad (8.3)$$

также является собственной функцией, соответствующей тому же собственному значению, что и (8.1). Естественным обобщением спаривания, рассматриваемого в теории БКШ, теперь будет введение связи между состояниями (8.1) и (8.3).

Воспользовавшись набором собственных функций ψ_n , можно определить теперь операторы рождения C_n^+ и уничтожения C_n . Тогда та часть гамильтониана, которая приводит к появлению энергетической щели, примет вид

$$H = - \sum_{nn'} V_{nn'} C_n^+ C_{-n}^+ C_{-n'} C_{n'}. \quad (8.4)$$

Входящие сюда матричные элементы $V_{nn'}$ можно выразить через матричные элементы $V_{kk'}$ относительно блоховских состояний.

Определив $V_{nn'}$, можно повторить все рассуждения теории БКШ, с помощью которых было получено выражение для энергетической щели в сверхпроводнике. Если концентрация примесей велика, то $V_{nn'}$ представляет собой среднее значение $V_{kk'}$ на поверхности Ферми. В связи с этим мы вправе ожидать, что в том случае, когда применима теория Андерсона, эффективные взаимодействия и энергетическая щель будут значительно менее анизотропны, чем у чистых сверхпроводников.

В „грязных“ сверхпроводниках время релаксации τ обычно имеет величину порядка 10^{-14} сек. Тогда неопределенность энергии электрона $h\tau^{-1}$ будет порядка 0,1 эв. Теория Андерсона, грубо говоря, применима, если неопределенность энергии имеет один порядок с величиной энергетической щели. Это эквивалентно требованию, чтобы средняя длина свободного пробега электрона не превышала длину когерентности.

§ 9. ТЕОРИЯ ГИНЗБУРГА — ЛАНДАУ

Прежде чем завершить эту главу, хотелось бы еще обсудить основные свойства жестких сверхпроводников (сверхпроводников второго рода), которые сейчас интенсивно исследуются. Мы увидим, что для описания жестких сверхпроводников необходимо ввести пространственно неоднородную плотность сверхтекучей компоненты, что и было положено в основу плодотворной теории Гинзбурга — Ландау.

Ниже мы ограничимся изложением феноменологического рассмотрения Гинзбурга и Ландау [80], но укажем, что, используя формулировку метода БКШ с помощью функций Грина, Горьков [86] дал микроскопическое обоснование этой теории.

В теории Гинзбурга — Ландау вводится функция $\Psi(\mathbf{r})$, квадрат которой $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ определяет плотность сверхпроводящих электронов в точке \mathbf{r} . Таким образом, Ψ представляет собой своего рода эффективную волновую функцию, хотя, например, согласно теории Горькова функция Ψ пропорциональна локальной энергетической щели $\Delta(\mathbf{r})$. Такой результат очень

правдоподобен, так как вероятность рождения сверхпроводящих электронов непосредственно связана с величиной Δ .

При наличии магнитного поля $H(\mathbf{r})$ полную свободную энергию сверхпроводящего состояния, по-видимому, можно выразить через Ψ следующим образом:

$$F \equiv \int d\mathbf{r} F_H^s(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} \left\{ F_0^s(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m} \left| -i\hbar\nabla\Psi - \frac{e^*}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \Psi \right|^2 + \frac{H^2(\mathbf{r})}{8\pi} \right\}. \quad (9.1)$$

Здесь e^* — заряд одной из „частиц“, образующих сверхтекущую компоненту. Такими „частицами“, как теперь известно, являются куперовские пары, откуда следует, что $e^* = 2e$. Член F_0^s имеет вид

$$F_0^s = \frac{H_c^2(T)}{8\pi} \left(1 - 2 \left| \frac{\Psi}{\Psi_0} \right|^2 + \left| \frac{\Psi}{\Psi_0} \right|^4 \right), \quad (9.2)$$

где Ψ_0 соответствует значению Ψ при нулевом внешнем поле. Правую часть (9.2) можно рассматривать как разложение по степеням Ψ , где сохранены лишь первые члены разложения, так что оно наиболее точно вблизи точки фазового перехода. Коэффициенты выбраны таким образом, чтобы это выражение удовлетворяло следующим условиям: 1) $F_0^s = H_c^2(T)/8\pi$ при $\Psi = 0$ и 2) $\partial F_0^s / \partial \Psi = 0 = F_0^s$ при $\Psi = \Psi_0$.

Прежде чем переходить к дальнейшему изложению, удобно ввести приведенные величины, предложенные Абрикосовым [2]:

$$\frac{\Psi}{\Psi_0} = \psi, \quad \frac{\mathbf{A}}{\sqrt{2}H_c(T)} = \mathbf{a}, \quad \frac{\mathbf{H}}{\sqrt{2}H_c(T)} = \mathbf{h}, \quad K = \frac{\sqrt{2}e^*}{\hbar c} H_c(T) \lambda_L^2. \quad (9.3)$$

В определение K входит характеристическая длина

$$\lambda_L^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^{*2} |\Psi_0|^2}, \quad (9.4)$$

используя которую, можно переписать свободную энергию в форме

$$\frac{F}{H_c^2(T)/4\pi} = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} - |\psi|^2 + \frac{1}{2} |\psi|^4 + \left| \frac{i}{K} \nabla\psi + \mathbf{a}\psi \right|^2 + h^2(\mathbf{r}) \right\}. \quad (9.5)$$

Будем теперь варьировать (9.5) по ψ и \mathbf{a} . Соответствующие уравнения Эйлера имеют вид

$$\left[\frac{i}{K} \nabla + \mathbf{a} \right]^2 \psi = \psi - |\psi|^2 \psi \quad (9.6)$$

и (так как $\mathbf{h} = \text{rot } \mathbf{a}$)

$$-\text{rot rot } \mathbf{a} = |\psi|^2 \mathbf{a} + \frac{i}{2K} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (9.7)$$

Уравнения (9.6) и (9.7) и есть уравнения Гинзбурга — Ландау. Для функций ψ , являющихся решением этих уравнений, выражение (9.5) принимает вид

$$\frac{F}{H_c^2(T)/4\pi} = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} |\psi|^4 + h^2(\mathbf{r}) \right\}. \quad (9.8)$$

Величины $H_c(T)$, λ_L и K представляют собой три основных параметра теории. Первый из них есть термодинамическое объемное критическое поле, определяемое следующим образом:

$$\frac{H_c^2(T)}{8\pi} = - \int_0^\infty M dH. \quad (9.9)$$

Для сверхпроводников первого рода определение (9.9) вряд ли необходимо, поскольку для них $H_c(T)$ представляет собой обычное критическое поле, выше которого $M = 0$, а ниже $M = -H/4\pi$, как в идеальном диамагнетике. В сверхпроводниках второго рода зависимость $M(H)$ более сложна (см. фиг. 77 и ее обсуждение в тексте), поэтому необходимо использовать более общее соотношение (9.9).

1. Поверхность сверхпроводника

Для выяснения смысла параметра λ_L рассмотрим сверхпроводник, занимающий полупространство $x > 0$ при наличии в области $x < 0$ малого внешнего поля h_0 . Значения поля и вектор-потенциала внутри сверхпроводника показаны на фиг. 75, где $a'(x) = h(x)$. Уравнения Гинзбурга — Ландау (9.6) и (9.7) при этом переходят в

$$-\frac{1}{K^2} \psi'' + a^2 \psi = \psi - |\psi|^2 \psi \quad (9.10)$$

и (пренебрегая в ψ членами, квадратичными по h_0)

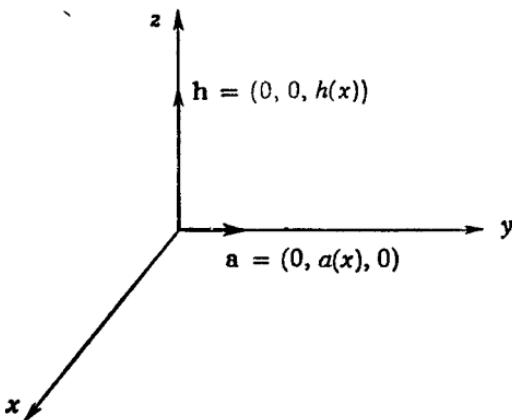
$$a'' = a. \quad (9.11)$$

Простейшее решение уравнения (9.11) имеет вид $a = -h_0 e^{-x}$, $h = h_0 e^{-x}$. Следовательно, параметр $\lambda_L (= 1)$ определяет глубину проникновения поля в сверхпроводник, т. е. фактически представляет собой обычную лондоновскую глубину проникновения. Теперь в (9.10) можно использовать явное выражение для a , чтобы получить информацию о ψ . Разлагая ψ в ряд по степеням h_0^2 и пренебрегая членами с h_0^4 , с помощью простейших методов находим [55]

$$\psi = 1 - \frac{K}{\sqrt{2}(2-K^2)} \left[e^{-\sqrt{2}Kx} - \frac{K}{\sqrt{2}} e^{-2x} \right] h_0^2, \quad (9.12)$$

где мы воспользовались граничным условием $\psi'(x) = 0$ при $x = 0$.

Численную оценку безразмерного параметра K , единственного параметра, входящего в (9.6) и (9.7) в явном виде, можно произвести различными методами [85], используя (9.4). Оказывается, что для мягких сверхпроводников K_0 (значение K при $T = 0$) обычно имеет величину порядка 0,1, а характерное значение его для жестких сверхпроводников по порядку величины больше.

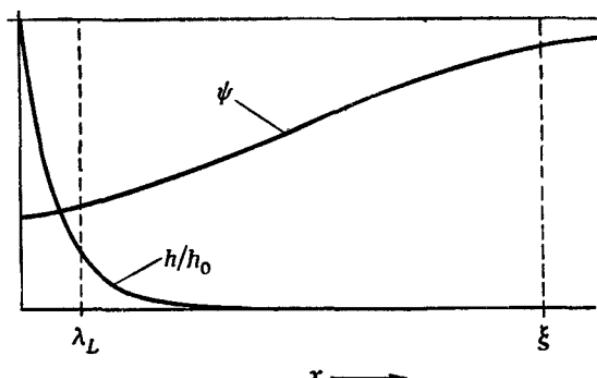


Фиг. 75.

При $K \ll 1$ первая экспонента в (9.12), очевидно, значительно превышает вторую, и функция ψ возрастает до своего асимптотического значения, равного единице, на расстоянии порядка $[\sqrt{2K}]^{-1}$. Последнее и определяет длину когерентности ξ . Таким образом мы вправе ожидать, что $K \approx \lambda_L/\xi$; почти точно такое значение и было получено в расчетах Горькова.

При $K \gtrsim 1$ возникает совершенно иная физическая картина, для понимания которой прежде всего необходимо дать качественное определение понятия поверхностной энергии (см., например, книгу Ф. Лондона [132]). Из-за выталкивания внешнего поля H_0 из сверхпроводника энергия на единицу объема возрастает на величину $H_0^2/8\pi$. Если принять во внимание только этот факт, то весь образец должен разбиться на сверхпроводящие области шириной $d_s < \lambda_L$, отделенные друг от друга нормальными участками шириной $d_n \ll \lambda_L$. Так как $d_n/d_s \ll 1$, то наиболее выгодным является образование куперовских пар, а условие $d_s < \lambda_L$ означает (фиг. 76), что поле повсюду должно быть близко к H_0 . Однако обычно это не имеет места, так как существует положительная поверхностная энергия. Грубую

ценку ее величины можно получить следующим образом. Зачет граничного слоя объем сверхпроводящей фазы уменьшается на величину порядка произведения ξ на площадь поверхности. Далее, эффективный объем, в который не проникает поле, можно получить, вычитая из полного объема произведение λ_L на площадь поверхности. Следовательно, поверхностная энергия, приходящаяся на единицу поверхности, равна произведению $\xi - \lambda_L$ на $H_0^2/8\pi$. Если $K \ll 1$, то $\xi - \lambda_L > 0$ и



и г. 76. Функция ψ , определяемая при малых h_0 соотношением (9.12).

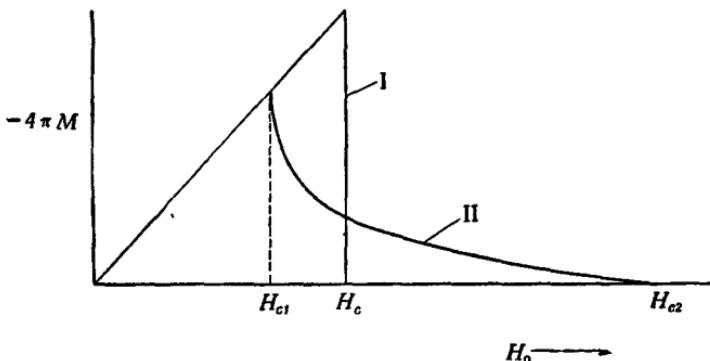
поверхностная энергия положительна. Однако при $K \geq 1$ величина $\xi - \lambda_L$ отрицательна, вследствие чего возникает неустойчивость описанного выше типа, и сверхпроводник разбивается на нормальные и сверхпроводящие области.

Абрикосов показал, что уравнения Гинзбурга – Ландау можно использовать для построения количественной теории этих явлений. Он обнаружил, что пороговое значение K равно $1/\sqrt{2}$ (чем устанавливается четкое определение различия между сверхпроводниками первого и второго рода). Выше этого порогового значения сверхпроводящие области принимают форму зигзаговых нитей. Их описанию будет посвящен следующий параграф.

10. ТЕОРИЯ АБРИКОСОВА СВЕРХПРОВОДНИКОВ ВТОРОГО РОДА

На фиг. 77 показаны кривые зависимости намагниченности от приложенного поля для типичных сверхпроводников первого и второго рода. В первом случае имеется одно критическое значение поля H_c , а у сверхпроводников второго рода существует, как это видно, два критических значения. Первое из них H_{c1} соответствует значению поля, при котором магнитный

поток начинает проникать в образец, а другое H_{c2} соответствует полному проникновению поля. Недавно было показано [177], что вокруг образца сохраняется очень устойчивая (сверхпроводящая) поверхностная пленка, вследствие чего очень слабый диамагнитный эффект наблюдается вплоть до некоторого максимального значения H_{c3} . В дальнейшем мы не будем рассматривать этот эффект, а ограничимся исследованием основных явлений в интервале $H_{c1} < H < H_{c2}$. Если площади под двумя кривыми на фиг. 77 одинаковы, то в силу (9.9) поле H_c будет представлять собой термодинамическое критическое поле для сверхпроводника второго рода.



Фиг. 77.

Ясно, что при значениях поля, превышающих H_{c1} , должно иметь место образование отдельных слоев (областей), упомянутое в конце предыдущего параграфа. Таким образом, необходимо пересмотреть уравнения Гинзбурга — Ландау с учетом этого нового физического эффекта. В этом случае уже невозможна ситуация, изображенная на фиг. 76. Удобно исследовать два частных случая: 1) H_0 лежит вблизи H_{c2} , 2) H_0 лежит вблизи H_{c1} .

1) $H_0 \leq H_{c2}$. Начнем с того, что выберем в качестве нулевого приближения (см. фиг. 75) условие $h = h_0$, где h_0 — константа. Тогда с точностью до постоянного множителя, определяющего положение плоскости yz , имеем $a = h_0 x$. Кроме того, нам теперь известно, что ψ является малой величиной. Следовательно, в этом приближении можно пренебречь вторым уравнением Гинзбурга — Ландау, которое однородно и квадратично по ψ , и решить первое, пренебрегая кубическим членом $|\psi|^2 \psi$.

Если предположить, что ψ не зависит от y , то мы снова получим уравнение (9.10), где теперь уже $a = h_0 x$. Таким обра-

зом, мы получаем уравнение Шредингера для простого гармонического осциллятора. Чтобы решения такого уравнения были ограничены, должно иметь место соотношение $h_0 = K/(2n + 1)$. Следовательно, наибольшее допустимое значение h_0 равно K (при $n = 0$); откуда получаем [см. соотношение (9.3) и фиг. 77]

$$H_{c2} = \sqrt{2}KH_c. \quad (10.1)$$

Соответствующая собственная функция пропорциональна $\exp(-K^2x^2/2)$.

Однако полученный результат не может быть признан удовлетворительным, так как функция ψ оказалась сильно локализованной в направлении оси x , что не имеет физического смысла. Для разрешения возникшего затруднения укажем, что уравнению (9.6) (без члена $|\psi|^2\psi$ в правой части) удовлетворяет целое семейство функций

$$\psi_n = \exp(ikny) \exp\left\{-\frac{1}{2}K^2\left[x - \left(\frac{kn}{K^2}\right)\right]^2\right\}, \quad (10.2)$$

для которых выполняется условие (10.1). Тогда функция

$$\psi = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \psi_n \quad (10.3)$$

также может быть решением, если c являются периодическими функциями n , что обеспечивает периодичность ψ по x и y с периодами, равными соответственно k/K^2 и $2\pi/k$. При $H = H_{c2}$ величина k совершенно произвольна, она принимает определенные значения лишь при поле H , меньшем H_{c2} (здесь k играет роль параметра, минимизирующего энергию системы). Эта задача была подробно исследована Абрикосовым; мы ограничимся здесь лишь кратким изложением его метода.

Учтем теперь квадратичные по ψ члены при подстановке (10.3) в (9.7). Это приведет к следующему изменению величин h и a :

$$h = h_0 - \frac{1}{2K} |\psi|^2 \quad (10.4)$$

и

$$a = h_0 x - \frac{1}{2K} \int_0^x |\psi|^2 dx. \quad (10.5)$$

Затем учтем члены третьего порядка, подставляя (10.4) и (10.5) в (9.6), где на этот раз сохраняется член $|\psi|^2\psi$. Это приводит к уравнению

$$\frac{K - h_0}{K} |\overline{\psi}|^2 + \left(\frac{1}{2K^2} - 1\right) |\overline{\psi}|^4 = 0, \quad (10.6)$$

где черточкой обозначено макроскопическое среднее.

Теперь можно уже вычислить интересующие нас макроскопические переменные. Для магнитной индукции из (10.4) получаем

$$b = h = h_0 - \frac{(K - h_0)}{(2K^2 - 1) \beta}, \quad \beta = \frac{|\psi|^4}{(|\psi|^2)^2}, \quad (10.7)$$

а определяемая соотношением (9.8) свободная энергия пропорциональна

$$f_1 = \frac{1}{2} + b^2 - \frac{(K - b)^2}{1 + (2K^2 - 1) \beta}. \quad (10.8)$$

Отсюда ясно, что для того, чтобы минимизировать f_1 при заданном b , необходимо выбрать как можно меньшее значение β .

До сих пор результаты не зависели от конкретного выбора коэффициентов c в разложении (10.3). Но на этой стадии при минимизации, β необходимо каким-то образом определить коэффициенты c_n (периодические по n). Строго говоря, это следовало бы сделать, исходя из энергетических соображений, но такая задача очень сложна. Однако оказывается, что наилучшим является простейший выбор, когда все c равны между собой. В этом случае

$$\beta = \frac{k}{KV2\pi} \left\{ \sum_n \exp \left(-\frac{k^2}{2K^2} n^2 \right) \right\}^2 \quad (10.9)$$

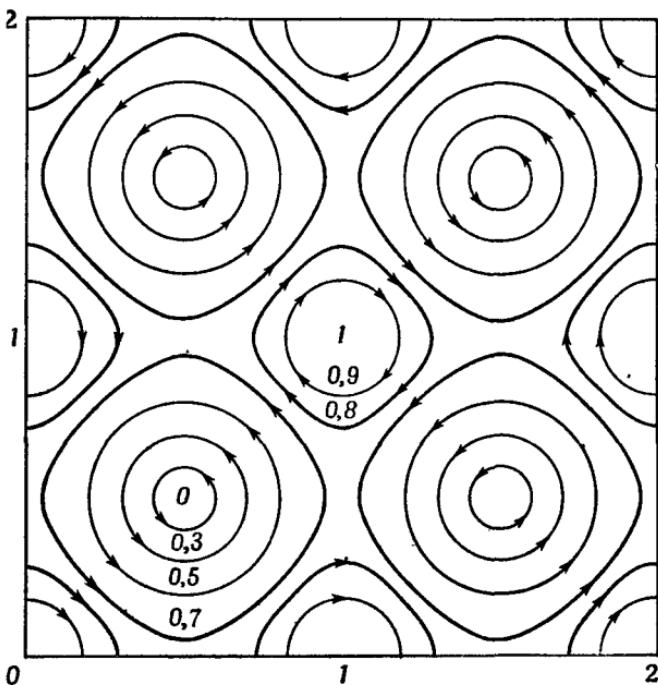
и минимальное значение β , равное 1,18, достигается при $k = K\sqrt{2\pi}$. Тогда, вводя $b = h + 4\pi m$, для внешних полей, немного меньших H_{c2} , из (10.7) находим

$$-4\pi m = \frac{1}{1,18(2K^2 - 1)} (h_{c2} - h_0). \quad (10.10)$$

Как полученная линейная зависимость величины $4\pi m$ от $h_{c2} - h_0$ (см. фиг. 77), так и значение константы пропорциональности в (10.10) подтверждаются экспериментальными данными. На фиг. 78 изображены в плоскости xy геодезические линии соответствующим образом нормированных постоянных значений $|\psi|^2$, вычисленные с помощью полученного нами решения. Стрелками указано направление токов. Очевидно, что мы имеем здесь вихревую структуру.

2) H_0 немного больше H_{c1} . Рассмотрим теперь случай, когда поле H_0 удаляется от значений, близких к H_{c2} . Можно предполагать, что при этом вихревые нити сохраняются, но расстояние между ними увеличивается. Такое предположение находится в качественном согласии с ходом кривой намагни-

ченности на фиг. 77. В предельном случае $H_0 = H_{c1}$ можно рассматривать (по крайней мере в первом приближении) полностью изолированную вихревую нить.



Фиг. 78.

Тогда, выбирая направление \mathbf{a} перпендикулярно радиус-вектору и вводя $\Psi = f e^{i\theta}$, перепишем (9.6) и (9.7) в виде

$$-\frac{1}{K^2 r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{df}{dr} \right) + q^2 f = f - f^3, \quad (10.11)$$

$$\frac{d}{dr} \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (rq) \right] = qf^2, \quad (10.12)$$

где $q = |\mathbf{a} - K^{-1}\nabla\theta|$. Поле определяется уравнением

$$h = -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (rq). \quad (10.13)$$

Уравнения (10.11) и (10.12) решаются с граничными условиями $f \rightarrow 1$ при $r \rightarrow \infty$ (f всюду конечна), $q \sim |K^{-1}\nabla\theta| = 1/Kr$ при $r \rightarrow 0$ и $q \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Последнее условие означает, что $\mathbf{a} \sim 1/Kr$ при больших r , поэтому магнитная индукция,

соответствующая одной вихревой нити, равна

$$b = \int h dS = \oint \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} = \frac{1}{Kr} \cdot 2\pi r = \frac{2\pi}{K}. \quad (10.14)$$

Теперь задача достаточно четко сформулирована, но ее аналитическое решение, по-видимому, возможно лишь при $K \gg 1$. Поэтому в дальнейшем будем рассматривать только этот случай. При $r < 1$ можно учитывать в q только основной член $\sim 1/Kr$. Подставим это значение в (10.11) и будем искать решение в виде ряда; тогда получаем

$$\begin{aligned} f^2 &= 1 - \frac{1}{K^2 r^2} + \dots \quad (Kr > 1), \\ f &= \text{const} \cdot r + \dots \quad (Kr < 1). \end{aligned} \quad (10.15)$$

Воспользуемся теперь этими разложениями для вычисления (9.8), где после несложных преобразований с учетом (10.13) и (10.14) получаем для энергии на единицу длины нити

$$\epsilon = \pi \int_0^\infty \left[(1 - f^4) r - f^2 \frac{d}{dr} (r^2 q^2) \right] dr. \quad (10.16)$$

Заменяя область интегрирования интервалом, дающим наибольший вклад, который в силу вышесказанного равен $(1/K, 1)$, в результате получаем основной вклад в виде $(2\pi/K^2) \ln K$. С помощью численных методов Абрикосов получил следующий член и показал, что более точный результат имеет вид $(2\pi/K^2) (\ln K + 0,081)$. Для перехода от идеально диамагнитного состояния к вихревой структуре должно выполняться условие $\epsilon < 2h_{c1}b$. Следовательно, переход происходит при значении внешнего поля, равном

$$h_{c1} = \frac{1}{2K} (\ln K + 0,081) \quad (K \gg 1), \quad (10.17)$$

что довольно хорошо согласуется с экспериментом. Абрикосов вычислил также энергию взаимодействия между вихрями и равновесную плотность вихревых нитей, а отсюда и поведение кривой на фиг. 77 при значениях H , лежащих непосредственно за H_{c1} .

ЗАДАЧИ

7.1. Пусть параметры u и v волновой функции БКШ являются комплексными и удовлетворяют следующим условиям

$$u_K = u_{-K}, \quad v_K = -v_{-K}, \quad |u_K|^2 + |v_K|^2 = 1. \quad (1)$$

Кроме того, пусть гамильтониан \mathcal{H} не заменяется модельным гамильтонианом (4.1), а записывается в виде

$$\mathcal{H} = \sum \epsilon_K a_K^\dagger a_K + \frac{1}{2} \sum V(K_1 K_2 K'_1 K'_2) a_{K_1}^\dagger a_{K_2}^\dagger a_{K'_2} a_{K'_1}. \quad (2)$$

Преобразовать (4.18) и (4.19), следуя общему методу, описанному в § 5, п 1, и представить \mathcal{H} в форме

$$\mathcal{H} = \epsilon + \sum E_K a_K^\dagger a_K + H_{\text{вз}}, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \epsilon = \sum_K \left\{ \epsilon_K + \frac{1}{2} \sum_{K'} [V(KK'KK') - V(KK'K'K)] |v_{K'}|^2 \right\} |v_K|^2 + \\ + \frac{1}{2} \sum_{KK'} V(K - KK' - K') u_K v_K u_{K'} v_{K'}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$E_K = \sqrt{\xi_K^2 + |\Delta_K|^2}, \quad (5)$$

$$\xi_K = \epsilon_K + \sum_{K'} [V(KK'KK') - V(KK'K'K)] |v_{K'}|^2, \quad (6)$$

$$|v_K|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_K}{E_K} \right), \quad |u_K|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_K}{E_K} \right), \quad (7)$$

$$H_{\text{вз}} = \frac{1}{2} \sum V(K_1 K_2 K'_1 K'_2) N_a(a_{K_1}^\dagger a_{K_2}^\dagger a_{K'_2} a_{K'_1}) \quad (8)$$

и где Δ_K удовлетворяет уравнению

$$\Delta_K = -\frac{1}{2} \sum_{K'} V(K - KK' - K') \frac{\Delta_{K'}}{E_{K'}}. \quad (9)$$

7.2. В уравнение (9) задачи 7.1 подставить выражение

$$V_{KK'} = \begin{cases} \frac{1}{\Omega} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l 2\pi V_l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{l'm}(\theta', \phi'), & |\epsilon_K|, |\epsilon_{K'}| < \delta, \\ 0 & \text{в остальных случаях}; \end{cases} \quad (10)$$

здесь θ, ϕ — углы, определяющие направление вектора \mathbf{k} . Указанная подстановка эквивалентна такому разложению плоских волн, входящих в определение $V(K, -K, K', -K')$, по сферическим гармоникам, в котором пренебрегается зависимостью от k в тонкой энергетической оболочке. Если при этом считать, что $V_l = 0$ ($l \neq 0$) и $2\pi V_0 = -V$, то получаем (5.19). Применяя метод, использованный при выводе соотношения (4.24), показать, что для любого l , при котором $V_l < 0$, существует решение уравнения (9) в виде

$$\Delta(\theta, \phi) = 2\delta \Gamma e^{-1/\rho V_l} Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (11)$$

где

$$\ln \Gamma = - \int \int |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \ln |Y_{lm}(\theta, \phi)| \sin \theta d\theta d\phi. \quad (12)$$

Следовательно, даже при наличии потенциала отталкивания V_0 будет происходить образование пар, если хотя бы один из V_l является потенциалом притяжения. Правда, величина щели не обязательно будет совпадать с (11), так как это соотношение может быть лишь одним из многих решений уравнения (9). Отсюда следует, что при достаточно низких температурах He^3 может быть сверхтекучим, так как у него наряду с твердой отталкивателльной сердцевиной $V_0 > 0$ имеется дальнодействующая притягивающая ван-дер-ваальсовская часть потенциала взаимодействия $V_l < 0$ при достаточно больших l .

Этот пример исследовался Андерсоном и Морелем [Phys. Rev., 123, 1911 (1961)]. До настоящего времени сверхтекучесть He^3 еще не обнаружена.

7.3. Теория БКШ учитывает взаимодействие между квазичастицами, чему соответствует последний член соотношения (6.8). Получить соотношение, аналогичное (6.16), не учитывая этот член, и проверить справедливость утверждения (см. гл. 1, § 11) о том, что при рождении большого числа квазичастиц взаимодействие между ними приводит к разрушению картины независимых квазичастиц.

СИСТЕМЫ МНОГИХ БОЗОНОВ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема, которую мы будем изучать в этой главе, в основном сводится к нахождению решений уравнения Шредингера, симметричных относительно перестановки координат любой пары из N взаимодействующих частиц, содержащихся в объеме Ω . Такая симметрия является характерным свойством системы бозонов.

Так же как и в гл. 5 и 7, нашей основной целью будет вычисление спектра элементарных возбуждений изучаемых систем. При рассмотрении соответствующих квазичастиц (см. гл. 1, § 11) мы сможем однозначно установить их статистику. Это связано с тем, что отдельные бозоны, образующие систему, обладают моментом количества движения, равным целому кратному \hbar . В силу этого никакое возбуждение не может иметь момента количества движения, равного нечетному числу $\hbar/2$. Отсюда вытекает, что в многобозонной системе квазичастицы сами являются бозонами. (Заметим, что в § 2 теория фононов применяется к системе атомов или ионов, которые сами по себе могут быть фермионами, например в твердом He^3 . Статистика голых частиц в этом случае несущественна.) При этом становится явойной связь с термодинамическими соотношениями для низких температур, когда существенны только низшие состояния. При заданном спектре возбуждений $E(\mathbf{k})$ число заполнения \mathbf{k} -го состояния равно

$$n_{\mathbf{k}} = \{e^{\beta E(\mathbf{k})} - 1\}^{-1}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (1.1)$$

что позволяет проводить дальнейшее исследование обычным путем. Кроме того, мы увидим, что и другие важные физические характеристики определяются формой спектра $E(\mathbf{k})$.

С практической точки зрения необходимо делать различие между случаями сильного и слабого взаимодействия частиц. Во втором случае мы имеем в виду газ или жидкость, свойства которых можно связать (хотя и весьма косвенно) со свойствами системы N независимых бозонов. Именно на таком допущении основано изучение жидкого гелия. Большая часть настоящей главы, а особенно § 3, посвящена этой задаче.

Примером системы с сильным взаимодействием, для которой в качестве нулевого приближения не имеет смысла рассматривать газ независимых частиц, является твердое тело. В этом случае приемлема другая идеализация — упорядоченная совокупность неподвижных частиц, малая кинетическая энергия которых рассматривается как возмущение. Такой подход приводит нас к теории колебаний решетки, которая обсуждается в § 2. Следует отметить, что формально такая теория очень сходна с теорией излучения черного тела и теорией спиновых волн, причем квазичастицами упругих колебаний являются фононы, электромагнитного поля — фотоны, а спиновых волн — магноны. Между ними, конечно, существует различие, но не настолько значительное, чтобы рассматривать их независимо. Более подробную информацию по этим вопросам читатель может найти в книгах Гайтлера [94] и Маттиса [147].

§ 2. ФОНОНЫ

Теория колебаний решетки изложена во многих учебниках (см., например, книги Борна и Хуан Куя [29] и Займана [210]). Поэтому мы постараемся уделять как можно меньше внимания деталям теории, но дадим ее изложение, так как она, по-видимому, представляет собой наиболее простой пример перехода от системы частиц с сильным взаимодействием к системе квазичастиц, слабо взаимодействующих между собой.

1. Коллективные координаты и гармоническое приближение

Чтобы сконцентрировать внимание на общих аспектах теории многих тел, а не на частных вопросах, связанных со спецификой динамики решетки, ограничимся частным случаем решетки Браве, в которой все N атомов одинаковы. В этом случае, считая, что каждый атом колеблется возле некоторого положения в регулярной кристаллической решетке, мы можем получить интересные результаты с помощью простого предположения об устойчивости колебаний.

В рамках классической механики при соответствующем выборе (коллективных) координат достаточно малые колебания можно описать с помощью набора $3N$ независимых простых гармонических осцилляторов, по одному на каждую степень свободы. При квантовом описании, по-видимому, также должно быть возможно подобное разложение на независимые квантовые осцилляторы; оказывается, что так оно и есть на самом деле. В обоих случаях мы переходим к описанию системы в нормальных координатах, которые при достаточно малых

смещениях атомов определяют независимые друг от друга колебания.

Обозначим узлы решетки через a, b, \dots, m, \dots , а положения атомов — $r_a, r_b, \dots, r_m, \dots$. Смещение m -го атома из равновесного положения есть

$$u_m = r_m - m. \quad (2.1)$$

При малых смещениях полную потенциальную энергию можно разложить в ряд Тейлора по смещениям, который формально запишем в виде

$$V(r_a, \dots, r_m, \dots) = V_0 + V_1 + V_2 + V_3 + \dots \quad (2.2)$$

Как обычно, V_0 является несущественной константой, а член V_1 равен нулю. Если членом V_3 и членами более высокого порядка можно пренебречь, то полный гамильтониан примет вид

$$H = \frac{1}{2M} \sum_m p_m^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{mn \\ i,j}} A_{mn}^{ij} u_m^i u_n^j, \quad (2.3)$$

где u^i означает i -ю компоненту вектора u ,

$$A_{mn}^{ij} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_m^i \partial u_n^j} \right)_0 \quad (2.4)$$

и M — масса атома.

Индекс у скобки в правой части (2.4) показывает, что производная вычисляется в положении равновесия. Величина A_{mn}^{ij} в (2.3) удовлетворяет обычным физическим условиям трансляционной инвариантности, устойчивости и т. д.

В гармоническом приближении для гамильтониана (2.3) основная задача (как в классическом, так и в квантовом случае) состоит в диагонализации потенциальной энергии путем унитарного преобразования. При этом преобразовании кинетическая энергия сохраняет свою простую форму, и задача легко решается.

2. Классический случай

Подставляя $p_i = M \dot{u}_i$ в (2.3) и дифференцируя по времени, получаем классическое уравнение движения

$$M \ddot{u}_m = - \sum_{n,i} A_{mn}^{ij} u_n^i, \quad (2.5)$$

которое можно решить путем разложения смещения u_m в ряд по плоским волнам

$$u_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q U_q e^{-iq \cdot m}, \quad U_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m u_m e^{iq \cdot m}. \quad (2.6)$$

Подставляя это разложение в (2.5) и сравнивая одинаковые фурье-компоненты в правой и левой частях, находим

$$M\ddot{\mathbf{U}}_q = -\Lambda_q \mathbf{U}_q, \quad (2.7)$$

где Λ_q является квадратной матрицей размерности 3×3 с элементами

$$\Lambda_q^{ij} = \sum_n A_{0n}^{ij} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}}. \quad (2.8)$$

В правой части (2.8) индекс n мы положили равным 0 в силу трансляционной инвариантности.

Если предположить, что \mathbf{U}_q имеет вид $e_q e^{i\omega_q t}$, то система уравнений движения (2.5) распадается на $3N$ независимых уравнений движения линейных осцилляторов

$$\ddot{\mathbf{U}}_q^i = -(\omega_q^i)^2 \mathbf{U}_q^i, \quad (2.9)$$

частоты ω_q^i и векторы поляризации e_q^i , которых определяются из уравнений на собственные значения

$$\Lambda_q e_q^i = M (\omega_q^i)^2 e_q^i. \quad (2.10)$$

Спектр элементарных возбуждений. Из проведенного рассмотрения следует, что функция ω_q , определяющая дисперсию, представляет собой спектр элементарных возбуждений системы (квантовый вывод дается ниже). В связи с тем, что свойства этих дисперсионных кривых уже неоднократно подробно обсуждались [211, 43], мы приведем лишь краткий перечень основных из них.

а) Частота колебаний периодична, т. е.

$$\omega_{(q+G)}^i = \omega_q^i; \quad (2.11)$$

здесь G — произвольный вектор обратной решетки, определяемый соотношением $e^{iG \cdot m} = 1$, в котором m — любой вектор прямой решетки. Отсюда следует, что достаточно определить ω_q лишь в единичной ячейке обратной решетки, или в первой зоне Бриллюэна.

б) Функция ω_q^i линейна по q при малых q . В этом состоит характерное свойство колебаний решетки. Константа пропорциональности представляет собой групповую скорость распространения длинных волн в решетке, или скорость звука для рассматриваемой ветви спектра возбуждений. В этом состоит принципиальное отличие от случая идеальной системы без взаимодействия, где энергия элементарных возбуждений при малых q пропорциональна q^2 . Для упругой сплошной среды такой

линейный закон справедлив при любых q ; это означает, что атомный характер твердого тела не важен при длинах волн, больших по сравнению с периодом решетки.

в) Ветвь кривой ω_q^l с наибольшим наклоном в начале координат соответствует продольным колебаниям, а две другие — поперечным.

3. Квантовый случай

Установив основы метода, используемого в классической механике, нетрудно провести квантовомеханический анализ. Для этого в гармоническом гамильтониане (2.3) заменим импульс p оператором импульса $(\hbar/i)\nabla$. Как и в классическом случае, нашей задачей является переход от многочастичного уравнения к системе независимых уравнений для гармонических осцилляторов.

Успех замены переменных (2.6), с помощью которой было получено уравнение на собственные значения для векторов U_q , поощряет нас снова произвести фурье-преобразование смещения. Каждая из новых переменных симметрична относительно старых координат r_i , определяемых соотношением (2.1). Следовательно, любая волновая функция, построенная с помощью U_q , будет обладать нужной симметрией, что позволяет нам при последующем анализе не заботиться о требованиях симметрии. Нетрудно записать соответствующие операторы импульсов. Имеем

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial u_m^l} = \frac{\hbar}{i} \sum_{qj} \frac{\partial U_q^l}{\partial u_m^l} \frac{\partial}{\partial U_q^l} = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iq \cdot m} \frac{\partial}{\partial U_q^l}, \quad (2.12)$$

откуда

$$p_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iq \cdot m} p_q, \quad P_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-im \cdot q} p_m. \quad (2.13)$$

Так как $u_i^* = u_i$, $p_i^* = -p_i$, то условие вещественности собственных значений приводит к аналогичным соотношениям для векторов U и P :

$$U_q^* = U_{-q}, \quad P_q^* = P_{-q}. \quad (2.14)$$

В новых переменных кинетическая энергия записывается в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{2M} \sum_m \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iq \cdot m} p_q \right)^2 &= \frac{1}{2MN} \sum_{mql} e^{iq \cdot m} e^{il \cdot m} p_q p_l = \\ &= \frac{1}{2M} \sum_{ql} \delta_{q,-l} p_q \cdot p_l = \frac{1}{2M} \sum_q p_q \cdot p_{-q}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

а потенциальная энергия — в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{mnij} A_{mn}^{ij} \left(\frac{1}{V^N} \sum_q U_q^i e^{-iq \cdot m} \right) \left(\frac{1}{V^N} \sum_r U_r^j e^{-ir \cdot n} \right) = \\ = \frac{1}{2N} \sum_{ijqr} \left(\sum_{mn} A_{mn}^{ij} e^{-i(q \cdot m + r \cdot n)} \right) U_q^i U_r^j = \\ = \frac{1}{2N} \sum_{ijqr} \left(\sum_n e^{-i(q+r) \cdot n} \right) \left(\sum_h A_{h0}^{ij} e^{-iq \cdot h} \right) U_q^i U_r^j, \end{aligned}$$

где снова использовано свойство трансляционной инвариантности. Тогда с помощью (2.8) для потенциальной энергии находим

$$\frac{1}{2N} \sum_{ijqr} N \delta_{q,-r} \Lambda_q^{ij} U_q^i U_r^j = \frac{1}{2} \sum_{ijq} \Lambda_q^{ij} U_q^i U_{-q}^j. \quad (2.16)$$

Объединяя (2.15) и (2.16), имеем

$$H = \sum_q H_q, \quad (2.17)$$

где

$$H_q = \frac{1}{2M} \mathbf{P}_q \mathbf{P}_q^* + \frac{1}{2} \sum_{ij} \Lambda_q^{ij} U_q^i U_q^{j*}. \quad (2.18)$$

Итак, мы снова успешно решили задачу сведения многочастичного гамильтониана к сумме одночастичных гамильтонианов. Классическим аналогом этой процедуры является переход от (2.5) к (2.7).

a) Диагонализация гамильтониана. Наша конечная цель состоит в том, чтобы представить уравнение движения в форме, сходной с полученной в классическом случае (2.9). Для этого мы воспользуемся тем же методом, что и раньше, а именно диагонализуем потенциальную энергию с помощью унитарного преобразования; форма кинетической энергии остается при этом инвариантной. Обозначим новые переменные через \mathbf{U}_q , а матрицу преобразования через Q_q , т. е.

$$\mathbf{U}_q = Q_q \mathbf{U}_q, \quad Q_q^{*T} Q_q = I, \quad (2.19)$$

где индексом T отмечена транспонированная матрица, I — единичная матрица. Из структуры уравнения (2.10) следует, что потенциальная энергия в (2.18) должна записываться в форме

$$\frac{1}{2} \sum M(\omega_q^i)^2 \mathbf{U}_q^i \mathbf{U}_q^{i*}, \quad (2.20)$$

а столбцы матрицы Q_q строятся из векторов поляризации e_q^i ($i = 1, 2, 3$). Последнее означает, что $Q^{ij} = e^{ij}$, где как Q^{ij} , так и e^{ij} обозначают i -ю компоненту вектора e^j .

Новый импульс \mathfrak{P}_q получается таким же способом, как и в (2.12). При этом оказывается, что $\mathbf{P}_q = Q_q^* \mathfrak{P}_q$ (такой результат не удивителен, ибо координата и импульс являются канонически сопряженными величинами). Отсюда вытекает, что выражение для кинетической энергии остается неизменным, поскольку

$$\mathbf{P}_q^T \mathbf{P}_q^* = (Q_q^* \mathfrak{P}_q)^T (Q_q^* \mathfrak{P}_q)^* = \mathfrak{P}_q^T Q_q^* Q_q \mathfrak{P}_q^* = \mathfrak{P}_q^T \mathfrak{P}_q^* = \mathfrak{P}_q^T \mathfrak{P}_q. \quad (2.21)$$

Из (2.19) и (2.21) следует, что (2.18) можно записать в виде

$$H_q = \sum_{i=1}^3 H_q^i, \quad (2.22)$$

где

$$H_q^i = \frac{1}{2M} \mathfrak{P}_q^i \mathfrak{P}_q^{i*} + \frac{1}{2} M (\omega_q^i)^2 \mathfrak{U}_q^i \mathfrak{U}_q^{i*}. \quad (2.23)$$

Итак, и в этом случае полный гамильтониан записывается в виде суммы гамильтонианов $3N$ невзаимодействующих гармонических осцилляторов с частотами ω_q^i , а именно

$$H = \sum_{qi} H_q^i. \quad (2.24)$$

б) Операторы рождения и уничтожения фононов. Еще удобнее производить диагонализацию, если ввести операторы, „факторизующие“ выражение (2.23). Такими операторами являются (см. книгу Дирака [54])

$$\begin{aligned} a_q^i &= \frac{1}{(2\hbar M \omega_q^i)^{1/2}} \mathfrak{P}_q^i - i \left(\frac{M \omega_q^i}{2\hbar} \right)^{1/2} \mathfrak{U}_q^{i*}, \\ a_q^{i*} &= \frac{1}{(2\hbar M \omega_q^i)^{1/2}} \mathfrak{P}_q^{i*} + i \left(\frac{M \omega_q^i}{2\hbar} \right)^{1/2} \mathfrak{U}_q^i. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Полезны также и обратные соотношения, которые легко получить, исходя из соотношения

$$\mathfrak{U}_q^* = \mathfrak{U}_{-q}, \quad \mathfrak{P}_q^* = \mathfrak{P}_{-q}, \quad (2.26)$$

вытекающего из (2.14), (2.19) и равенства $\mathbf{P}_q = Q_q^* \mathfrak{P}_q$, и пользуясь также четностью функции ω_q^i по q , которая формально следует из (2.8) и (2.10). (Физически, конечно, очевидно, что

при изменении направления распространения плоской волны ее частота не должна меняться.) Обратные соотношения имеют вид

$$\begin{aligned} U_q^i &= -i \left(\frac{\hbar}{2M\omega_q^i} \right)^{1/2} (a_q^{i*} - a_{-q}^i), \\ \Phi_q^i &= \left(\frac{\hbar M \omega_q^i}{2} \right)^{1/2} (a_q^i + a_{-q}^{i*}). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Теперь можно сразу переписать (2.23) в форме

$$H_q^i = \frac{1}{2} \hbar \omega_q^i (a_q^i a_q^{i*} + a_q^{i*} a_q^i) \quad (2.28)$$

и непосредственно убедиться в том, что выполняются перестановочные соотношения статистики Бозе

$$[a_q^i, a_p^{j*}] = \delta_{qp} \delta_{ij}; \quad (2.29)$$

все другие коммутаторы равны нулю. Объединяя (2.23), (2.24), (2.28) и (2.29), записываем окончательно гамильтониан в простой форме

$$H = \sum_{q, i} \hbar \omega_q^i (a_q^{i*} a_q^i + \frac{1}{2}). \quad (2.30)$$

Таким образом, проблема свелась к простейшей ситуации, рассмотренной в § 1 (см. также гл. 1, § 11). Уравнение (2.30) соответствует набору независимых квазичастиц — фононов. В основном состоянии, в котором фононы отсутствуют, полная энергия равна нулевой энергии осцилляторов

$$\frac{1}{2} \sum_{q, i} \hbar \omega_q^i.$$

При рождении фона с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией i энергия возбуждения равна

$$E_q = \hbar \omega_q^i.$$

Отсюда следует, что дисперсионная кривая ω_q описывает спектр возбуждений.

В гармоническом приближении фононы являются независимыми квазичастицами. Фактически же опущенные в (2.2) ангармонические члены V_3 и т. д. приводят к фонон-фононному взаимодействию, которое мы кратко рассмотрим в п. 4. Сначала, однако, опишем один очень мощный метод, основы теории которого были разработаны преимущественно Ван Ховом [198, 200]. Этот метод позволяет непосредственно получить спектр элементарных возбуждений из эксперимента по неупру-

гому рассеянию нейтронов. Более подробное изложение метода содержится в книге Киттеля [113].

Прежде чем приступить к изложению затронутого вопроса, резюмируем результаты, полученные при переходе от исходных динамических переменных p и u к a и a^* (через P и U и Ψ и W). Используя (2.6), (2.19) и (2.27), находим

$$u_m^l = -i \sum_{q, l} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q^l} \right)^{1/2} e_q^{il} e^{-iq \cdot m} (a_q^{l*} - a_{-q}^l), \quad (2.31)$$

где появление векторов e_q^l объясняется замечаниями, сделанными после формулы (2.20). Следует отметить, что вопреки первому впечатлению u_m^l является вещественной величиной, в чем можно убедиться непосредственно. Для этого нужно изменить знак переменной q , по которой производится суммирование, и перейти к u_m^{l*} с учетом того, что ω_q представляет собой четную, а e_q — нечетную функцию от q . В представлении Гейзенберга формула (2.31) принимает вид [см. также (4.7.2) и (4.7.3)]

$$u_m^l(t) = -i \sum_{q, l} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q^l} \right)^{1/2} e_q^{il} [\exp \{-i(q \cdot m - \omega_q^l t)\} a_q^{l*} + \exp \{i(q \cdot m + \omega_q^l t)\} a_q^l], \quad (2.32)$$

где изменение знака индекса во втором члене сделано с учетом симметрии e и ω .

в) Корреляционные функции Ван Хова и сечение рассеяния нейтронов. Будем исходить из выражения

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{k'}{k} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_{l, f} p_l |\langle k' f | V | k i \rangle|^2 \delta(\omega + \epsilon_i - \epsilon_f), \quad (2.33)$$

определенного дифференциальное сечение рассеяния нейтронов в единичный телесный угол и на единицу энергии рассеянных нейтронов. Различные члены (2.33) имеют следующий физический смысл. Составная волновая функция системы нейtron — мишень до столкновения есть $|ik\rangle = |i\rangle e^{ik \cdot r}$, а после столкновения $|f k'\rangle = |f\rangle e^{ik' \cdot r}$. Здесь применимо борновское приближение [30], так что вероятность перехода пропорциональна квадрату матричного элемента $\langle k' f | V | k i \rangle$, где V — потенциал, на котором происходит рассеяние нейтронов. Входящая в (2.33) δ -функция выражает закон сохранения энергии: уменьшение энергии нейтрона $\omega = (\hbar^2/2m)(k^2 - k'^2)$ равно увеличению энергии $\epsilon_f - \epsilon_i$ мишени. Величины p_l представляют собой Больцмановские множители, определяющие равновесное температурное

распределение начальных состояний, а множитель перед знаком суммы определяет плотность конечных состояний и плотность частиц в падающем потоке (см., например, книгу Шиффа [182], гл. 8).

Воспользуемся теперь тождеством

$$\delta(\omega) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} dt$$

и (ограничиваясь немагнитными материалами) возьмем псевдо-потенциал Ферми в виде

$$V = \frac{2\pi\hbar^2}{m^2} b \sum_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m). \quad (2.34)$$

(Вообще говоря, даже для кристалла, состоящего из атомов только одного химического элемента, множитель b должен иметь индекс m , который характеризует спиновую и изотопическую зависимость длины рассеяния b . Ниже мы увидим, как можно учесть такую возможность.) Тогда (2.33) запишется следующим образом:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} = b^2 \frac{k'}{k} \sum_{i, f, m, n} p_i \langle i | \exp \{ -i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_m \} | f \rangle \langle f | \exp \{ i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n \} | i \rangle \times \times \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \{ -i(\omega + \epsilon_i - \epsilon_f)t \} dt, \quad (2.35)$$

где $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ — уменьшение импульса нейтрона.

Следующий шаг состоит во введении гейзенберговских операторов, зависящих от времени [см., например, (4.7.2)]. Отметим, что

$$\langle f | \exp \{ i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n(t) \} | i \rangle = \langle f | \exp \{ i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n \} (t) | i \rangle = \\ = \langle f | \exp \{ i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n \} | i \rangle \exp \{ i(\epsilon_f - \epsilon_i)t \}, \quad (2.36)$$

мы можем опустить в (2.35) множитель $\exp \{ -i(\epsilon_i - \epsilon_f)t \}$ и заменить \mathbf{r}_n на $\mathbf{r}_n(t)$. Тогда суммирование по f дает

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} = N b^2 \frac{k'}{k} S(\mathbf{K}, \omega), \quad (2.37)$$

где

$$S(\mathbf{K}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \{ -i\omega t \} \frac{1}{N} \sum_{m, n} \langle \exp \{ -i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_m(0) \} \times \times \exp \{ i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n(t) \} \rangle_T, \quad (2.38)$$

причем термодинамическое усреднение определяется соотношением

$$\langle O \rangle_T = \sum_i p_i \langle i | O | i \rangle. \quad (2.39)$$

Как мы увидим, функция $S(\mathbf{K}, \omega)$ оказывается очень полезной во многих случаях. Она обладает также некоторыми общими свойствами, имеющими фундаментальное значение. Прежде чем переходить к практической задаче определения энергетического спектра, остановимся на некоторых из этих свойств, так как в дальнейшем они могут нам понадобиться.

Прежде всего, как следует из (2.38), фурье-образ функции $S(\mathbf{K}, \omega)$ имеет вид¹⁾

$$\begin{aligned} S(\mathbf{K}, t) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \langle \exp \{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_m(0)\} \exp \{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n(t)\} \rangle_T = \\ &= \frac{1}{N} \langle \rho_{\mathbf{K}}(0) \rho_{-\mathbf{K}}(t) \rangle_T, \end{aligned} \quad (2.40)$$

где $\rho_{\mathbf{K}}$ — обычный фурье-образ плотности числа частиц [см., например, (5.5.2) или ниже]. При желании, можно произвести преобразование от \mathbf{K} к \mathbf{r} -пространству. С помощью (2.40) при этом получаем

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp \{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}\} \exp \{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_m(0)\} \times \right. \\ &\quad \left. \times \exp \{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n(t)\} d\mathbf{K} \right\rangle_T. \end{aligned} \quad (2.41)$$

При различных преобразованиях интеграла в правой части необходимо учитывать, что при $t \neq 0$ экспоненты не аддитивны. Однако, используя теорему о свертке для фурье-образов произведения операторов, можно записать этот интеграл в виде

$$S(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_m(0) - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_n(t)) \right\rangle_T. \quad (2.42)$$

Особый интерес для нас представляют величины (2.40) и (2.42) при $t = 0$. В первом случае имеем

$$S(\mathbf{K}) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{K}, \omega) d\omega = \frac{1}{N} \langle \rho_{\mathbf{K}} \rho_{-\mathbf{K}} \rangle_T. \quad (2.43)$$

¹⁾ Мы следуем здесь работе Ван Хова и не применяем обычную при фурье-преобразованиях нормировку, когда множитель $1/(2\pi)$ записывается в (\mathbf{K}, ω) -пространстве. При нашей нормировке асимптотическое значение величины $S(\mathbf{r}, t)$, определяемой выражением (2.42), равно плотности числа частиц.

Эта величина представляет собой структурный фактор, введенный в гл. 5, § 6. Во втором случае операторы координаты коммутируют, и мы получаем

$$S(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int S(\mathbf{K}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{K} = \frac{1}{N} \sum_{m, n} \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m + \mathbf{r}_n) \rangle_T. \quad (2.44)$$

Члены с $m = n$ дают δ -функцию в начале координат, а остальные члены определяют обычную асимптотически нормированную парную функцию распределения $g(r)$. Иначе говоря,

$$S(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) + \rho g(\mathbf{r}). \quad (2.45)$$

Наконец, исследуем, при каких условиях дифференциальное сечение рассеяния (2.37) можно проинтегрировать по энергии. Если начальная энергия падающего нейтрона велика по сравнению с $\hbar\omega$, то при фиксированном направлении рассеяния $\hbar\mathbf{K}$ не зависит от конечной энергии нейтрона. Тогда с помощью (2.43) и (2.45) получаем для дифференциального сечения рассеяния на единицу телесного угла

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} dE = Nb^2\hbar \frac{k'}{k} \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{K}, \omega) d\omega = Nb^2\hbar \frac{k'}{k} S(\mathbf{K}), \quad (2.46)$$

где в силу (2.45)

$$S(\mathbf{K}) = 1 + \rho \int g(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dr = 1 + \rho \int [g(\mathbf{r}) - 1] e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dr. \quad (2.47)$$

Справедливость второго из этих равенств обусловлена тем, что Fourier-преобразование единицы дает несущественную δ -функцию при $\mathbf{K} = 0$. В жидкостях (см. ниже) такая форма записи более удобна, так как в соответствии с (2.45) $g(r) \rightarrow 1$ при $r \rightarrow \infty$. Соотношения (2.46) и (2.47) используются для экспериментального определения $g(r)$.

Следует подчеркнуть, что проведенное рассмотрение применимо при любом расположении центров рассеяния, а не только к твердым телам. В этой главе некоторые из полученных результатов будут использованы для жидкостей. Кроме того, развитый формализм справедлив не только для нейронов, но и для других видов излучения (например, для рентгеновских лучей). Однако благодаря тому, что с помощью реактора легко получить нейтроны с длиной волны, сравнимой с межатомным расстоянием в решетке твердого тела, и с энергией, близкой к характерной энергии возбуждения, метод рассеяния нейронов позволяет экспериментально исследовать наиболее важную область (\mathbf{K}, ω) -пространства.

Ниже мы дадим дальнейшее развитие формализма для частного случая твердого тела и покажем, как можно использовать его для экспериментального определения спектра возбуждений.

а) Функция $S(\mathbf{K}, \omega)$ для твердого тела. Важная особенность соотношения (2.37) состоит в том, что в его правую часть входит функция $S(\mathbf{K}, \omega)$, свойства которой, как мы увидим ниже, могут быть изучены теоретически, в то время как в левой части стоит экспериментально измеряемая величина. На практике, если длина рассеяния b зависит от индексов [см. обсуждение выражения (2.34)], соотношение (2.37) для σ фактически не меняется, но только b заменяется средним значением $\langle b \rangle$. Оно определяет когерентную часть рассеяния, которую можно отделить от изотропного фона (некогерентной части), пропорционального $\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2$. Существуют общие методы, позволяющие разделить эти две компоненты при обработке экспериментальных данных (см., например, обзор Эгельстаффа [57]). Однако для определения спектра элементарных возбуждений в таких методах нет необходимости, так как входящие в когерентную часть однофононные процессы, описывающие эти возбуждения, легко выделяются из сложной картины.

Итак, рассмотрим подробно следующую часть подынтегрального выражения в (2.41):

$$\begin{aligned} & \langle \exp \{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_m(0)\} \exp \{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n(t)\} \rangle_T = \\ & = \exp \{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n})\} \langle \exp \{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0)\} \exp \{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t)\} \rangle_T = \\ & = \exp \{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n})\} \langle \exp \{-i\mathbf{K} \cdot [\mathbf{u}_m(0) - \mathbf{u}_n(t)]\} \rangle_T \times \\ & \quad \times \exp \left\{ \frac{1}{2} [\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0), \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t)] \right\} = \\ & = \exp \{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n})\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \langle [\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0) - \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t)]^2 \rangle_T \right\} \times \\ & \quad \times \exp \left\{ \frac{1}{2} [\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0), \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t)] \right\}. \quad (2.48) \end{aligned}$$

Каждый шаг проделанных преобразований требует небольших пояснений. Первый из них основан на использовании равенства (2.1) и совершается для того, чтобы перейти к функциям $\mathbf{u}(t)$, определяемым соотношениями (2.32). На следующей стадии применяется теорема (см. книгу Мессиа [150]), которая состоит в следующем: если каждый из операторов A и B коммутирует с коммутатором $[A, B]$, то $e^A e^B = e^{(A+B)} e^{\frac{1}{2}[A, B]}$. Если $A = -i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0)$, а $B = i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t)$, то это условие заведомо удовлетворяется. На самом деле, нетрудно видеть, что в этом случае коммутатор является просто c -функцией [см. (2.29) и последующие замечания]. Последний шаг в (2.48) совершается

с помощью следующего соотношения для одного осциллятора:

$$\langle e^{i\xi} \rangle_T = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \langle \xi^2 \rangle_T \right\},$$

где ξ — линейная комбинация соответствующих a и a^* (это соотношение также доказывается в книге Мессия [150])¹⁾. Так как мы в конечном итоге рассматриваем $3N$ независимых осцилляторов, это равенство безусловно применимо к (2.48).

Теперь, очевидно, необходимо вычислить показатели экспонент, входящих в (2.48). Используя для этого (2.32), получаем [82]

$$\begin{aligned} \langle u_m^I(0) u_n^J(t) \rangle_T = & \sum_{q, k} \frac{\hbar}{2MN\omega_q^k} e_q^{ik} e_q^{jk} [\exp \{-i[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n}) + \omega_q^k t]\} \langle a_q^{k*} a_q^k \rangle_T + \\ & + \exp \{i[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n}) + \omega_q^k t]\} \langle a_q^k a_q^{k*} \rangle_T]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

В силу (2.29) и (2.39) имеют место следующие соотношения:

$$\langle a_q^{k*} a_q^k \rangle_T = n_q^k, \quad \langle a_q^k a_q^{k*} \rangle_T = n_q^k + 1, \quad (2.50)$$

где

$$n_q^k = \left[\exp \left(\frac{\hbar \omega_q^k}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1}. \quad (2.51)$$

Если смещения в различных ячейках не коррелируют между собой, то стоящее в левой части (2.49) среднее значение их произведения должно быть равно нулю.

Этот результат необходимо обобщить. Записывая \mathbf{K} в виде $\mathbf{K} = (K^1, K^2, K^3)$, с помощью (2.49) получаем

$$\begin{aligned} \langle \{ \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0) \} \{ \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t) \} \rangle_T = & \sum_{l, I} K^l K^I \langle u_m^{l*}(0) u_n^I(t) \rangle_T = \\ = & \sum_{q, k} \frac{\hbar}{2MN\omega_q^k} (\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_q^k)^2 [\exp \{-i[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n}) + \omega_q^k t]\} n_q^k + \\ & + \exp \{i[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n}) + \omega_q^k t]\} (n_q^k + 1)]. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Теперь мы можем использовать это соотношение для вычисления (2.48).

Рассмотрим сначала коммутатор. Учитывая, что он является c -числом, имеем

$$\begin{aligned} [\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0), \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t)] = & \langle \{ \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0) \} \{ \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t) \} \rangle_T - \\ & - \langle \{ \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t) \} \{ \mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0) \} \rangle_T. \end{aligned} \quad (2.53)$$

¹⁾ См. также книгу: А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс, Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, изд-во „Мир“, 1965. — Прим. ред.

Другой неизвестный показатель экспоненты равен

$$\begin{aligned} \langle \{K \cdot u_m(0) - K \cdot u_n(t)\}^2 \rangle_T = \\ = \langle \{K \cdot u_m(0)\}^2 \rangle_T - \langle \{K \cdot u_m(0)\} \{K \cdot u_n(t)\} \rangle_T - \\ - \langle \{K \cdot u_n(t)\} \{K \cdot u_m(0)\} \rangle_T + \langle \{K \cdot u_n(t)\}^2 \rangle_T. \quad (2.54) \end{aligned}$$

Здесь последний член в действительности не зависит от времени, что можно показать, подставив явное выражение для $u_n(t)$ в форме $\exp(iH_0t)u_n\exp(-iH_0t)$. Следовательно, можно заменить t нулем. Кроме того, в силу (2.52) первый и четвертый члены правой части (2.54) не зависят от индексов ячеек решетки и равны по абсолютной величине (но входят с противоположным знаком). Отсюда следует, что подстановка (2.53) и (2.54) в (2.48) дает

$$\begin{aligned} \langle \exp \{-iK \cdot r_m(0)\} \exp \{iK \cdot r_n(t)\} \rangle_T = \\ = \exp \{-iK \cdot (m-n)\} \exp \{-2W\} \exp \{\langle [K \cdot u_m(0)] [K \cdot u_n(t)] \rangle_T\}, \quad (2.55) \end{aligned}$$

где

$$2W = \langle \{K \cdot u_m(0)\}^2 \rangle_T = \sum_{q, k} \frac{\hbar}{2MN\omega_q^k} (K \cdot e_q^k)^2 (2n_q^k + 1). \quad (2.56)$$

Зависящий от температуры член e^{-2W} называют фактором Дебая – Валлера.

Отметим теперь, что корреляционная функция флуктуаций (2.52) мала по сравнению с (2.56). В этом случае последнюю экспоненту в (2.55) можно разложить в ряд. Подставляя такое разложение в (2.38), находим, что различные члены полученного ряда, дающие вклады в $S(K, \omega)$, допускают простую физическую интерпретацию. Для наших целей достаточно рассмотреть только первые два члена.

В нулевом порядке находим

$$S_0(K, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{m, n} e^{-iK \cdot (m-n)} e^{-2W}. \quad (2.57)$$

Интегрирование по времени дает $\delta(\omega)$, что указывает на упругое рассеяние, а использование тождества [211]

$$\sum_{m, n} e^{-iK \cdot (m-n)} = (2\pi)^3 \Omega \sum_{\mathbf{G}} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{G}), \quad (2.58)$$

справедливого в рассматриваемом случае одноатомной решетки, приводит к закону рассеяния Брэгга. Влияние температуры сводится только к уменьшению высоты пиков в e^{2W} раз по сравнению с их значением для жесткой решетки.

В первом порядке имеем

$$S_1(\mathbf{K}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{m, n} e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{m} - \mathbf{n})} e^{-2W} \langle \{\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_m(0)\} \{\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_n(t)\} \rangle_T, \quad (2.59)$$

где температурное усреднение понимается в смысле (2.44). Производя интегрирование по времени и используя (2.51), находим

$$S_1(\mathbf{K}, \omega) = e^{-2W} \sum_{q, k} \frac{\hbar}{2MN\omega_q^k} (\mathbf{K} \cdot \mathbf{e}_q^k)^2 [\delta(\omega + \omega_q^k) \delta(\mathbf{K} + \mathbf{q} - \mathbf{G}) n_q^k + \delta(\omega - \omega_q^k) \delta(\mathbf{K} - \mathbf{q} + \mathbf{G})(n_q^k + 1)]. \quad (2.60)$$

Интерпретация этого результата с помощью операторов рождения и уничтожения фононов очевидна. При этом оказывается, что вклад второго слагаемого правой части (2.60) в дифференциальное сечение рассеяния (2.37) обусловлен рождением фона, при котором энергия нейтрона уменьшается на величину $\omega = \omega_q^k$, а импульс — на величину $\mathbf{q} - \mathbf{G}$. Подобно этому, первое слагаемое можно интерпретировать в терминах уничтожения фона.

Очевидно, что высшие члены в $S(\mathbf{K}, \omega)$ соответствуют многофононным процессам, однако мы не будем заниматься дальнейшим развитием теории. Мы хотим только еще раз подчеркнуть тот факт, что эта теория в соответствии с (2.37) дает нам наиболее прямой метод наблюдения спектра возбуждений. Не вдаваясь в конкретные детали метода, отметим самую существенную его черту, состоящую в том, что при фиксированном \mathbf{K} (и, следовательно, фиксированном угле рассеяния) на графике зависимости спектра неупругого рассеяния от ω имеется один или несколько острых пиков, обусловленных однофононными процессами (2.60). Эти пики налагаются на фон, обусловленный многофононными и некогерентными процессами. Более подробные сведения имеются в работах Ван Хова с сотрудниками [198, 200] и в Трудах конференции по неупругому рассеянию нейронов в жидкостях и твердых телах [104]¹). Необходимо также отметить сходство с определением спектра плазмонов с помощью заряженных частиц (см. гл. 5, § 12).

¹) См. также Труды конференции 1968 г. (Inelastic Scattering of Neutrons from Solids and Liquids, Copenhagen, 1968, Vienna, 1968). — Прим. ред.

4. Фонон-фононное взаимодействие

Как мы уже видели, гармоническое приближение соответствует системе независимых фононов. Во многих случаях, и в частности при низких температурах, когда число возбужденных фононов невелико, такое приближение достаточно хорошо, чем вполне оправдывается наше внимание к этому вопросу. Однако возможны случаи, в которых существенную роль играет учет ангармоничности. Так обстоит дело, например, при очень высокой температуре, когда число фононов велико. В частности, в гармоническом приближении невозможно описать такие явления, как тепловое расширение и плавление, для объяснения которых необходимо учитывать ангармонические члены. Учет ангармонических сил необходим также в теории явлений переноса. Сопротивление тепловому потоку в идеальном кристалле зависит от фонон-фононного рассеяния, которое отсутствует в гармоническом приближении, поэтому последнее ошибочно приводит к бесконечной теплопроводности. Чтобы учесть рассеяние фононов, достаточно добавить в качестве возмущения член, равный $\sum_3^\infty V_n$ [см. (2.2)].

Начнем с изучения члена V_3 , который определяется с помощью такого же метода разложения, как и член V_2 в (2.2)–(2.4):

$$V_3 = \frac{1}{3!} \sum_{\substack{mn \\ l'j'k'}} B_{mn}^{ljk} u_m^i u_n^j u_l^k. \quad (2.61)$$

Подставляя в (2.61) выражение (2.31) для u , получаем

$$V_3 = \frac{(-i)^3}{3!} \left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{3/2} \sum_{\substack{m'n'l' \\ l'j'k'}} \frac{B \left(\begin{matrix} l'j'k' \\ m'n'l' \end{matrix} \right)}{\left(\omega_m^{l'} \omega_n^{j'} \omega_l^{k'} \right)^{1/2}} \times \\ \times (a_{m'}^{l'*} - a_{-m'}^{l*})(a_{n'}^{l'*} - a_{-n'}^{l*})(a_{l'}^{k'*} - a_{-l'}^{k*}), \quad (2.62)$$

где

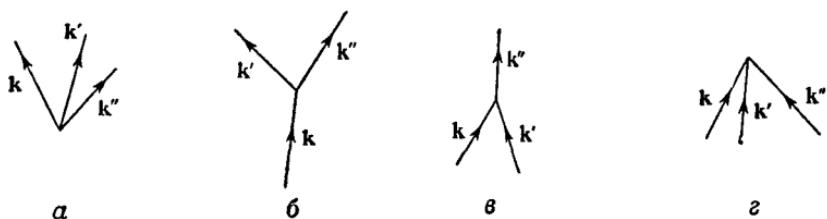
$$B \left(\begin{matrix} l'j'k' \\ m'n'l' \end{matrix} \right) = \sum_{\substack{mn \\ l'j'k'}} B_{mn}^{ljk} e_m^{l'} e_n^{j'} e_l^{k'} e^{-i(m'+m+n'+n+l'-l)} \quad (2.63)$$

[в соответствии с замечаниями, сделанными после соотношения (2.20), мы опять заменили Q на e].

Необходимо особо отметить два свойства V_3 . Во-первых, в силу периодичности решетки выражения (2.63), а следовательно, и (2.62) отличны от нуля только при выполнении закона сохранения квазимпульса

$$m' + n' + l' = G, \quad (2.64)$$

где \mathbf{G} – вектор обратной решетки. Если $\mathbf{G} = 0$, то мы имеем нормальный процесс, в противном случае – процесс переброса (см. [211]). Во-вторых, очевидно, что если перемножить в (2.62) операторы уничтожения и рождения, то образуются тройные произведения, которые можно изобразить графически (фиг. 79).



Фиг. 79. Графическое представление тройных произведений, $\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{G}$.
а – рождение трех фононов, б – переход одного фона на два фона; в – переход двух фононов в один фон, г – аннигиляция трех фононов.

Не представляет труда обобщить это рассмотрение на члены V_4, V_5, \dots . Для соответствующих 4-, 5-, ... фононных процессов нетрудно нарисовать диаграммы типа изображенных на фиг. 79 и написать законы сохранения квазимпульса типа (2.64). Таким образом, совокупность этих эффектов можно



Фиг. 80.

изучать методами квантовой теории поля. Например, на фиг. 80 изображена диаграмма второго порядка, соответствующая образованию двух фононов из одного и последующей их рекомбинации. Такие собственно-энергетические петли можно вставить в любую диаграмму, что приведет к увеличению ее порядка. В гл. 10 будет показано, что суммарный эффект всех возможных таких вставок сводится к перенормировке одночастичной энергии. Конечно, этот эффект будет автоматически учтен, если пользоваться экспериментально полученным дисперсионным соотношением для ω_q . Последовательное рассмотрение этой

задачи читатель может найти в работах Ван Хова, Гугенгольца и Хоуланда [200], Каррuterса [42] и Коккеди [116, 117]¹⁾.

На этом мы завершаем рассмотрение фононов в кристаллах. Перейдем теперь к более сложной проблеме фононов в жидкостях и газах.

5. Фононы в классических жидкостях

Макроскопическая теория звука в газах и жидкостях достаточно хорошо разработана. При распространении звука происходят длинноволновые продольные изменения плотности (или давления) со скоростью $(dP/d\rho)^{1/2}$, где P — давление при плотности ρ . В связи с тем, что для газов и жидкостей понятие сдвигового напряжения обычно не имеет смысла, здесь не существует колебаний, аналогичных известным поперечным колебаниям в твердом теле (для частот ниже некоторой критической).

Перейдем к соответствующей микроскопической классической теории. Здесь нетрудно получить качественные результаты. При относительном поперечном смещении соседних атомов возникают очень слабые силы, стремящиеся вернуть конфигурацию к исходному состоянию. В связи с этим понятие сдвиговых волн, как было отмечено выше, становится весьма неопределенным. Вместе с тем при продольных смещениях локальные отклонения от однородного состояния приводят к появлению локальных градиентов давления. Любой выделенный атом испытывает удары главным образом со стороны области с более высоким давлением, и в результате приобретает некоторый суммарный импульс, направленный в область с низким давлением. В целом эффект приводит к переходу атомов в области, в которых первоначально давление было более низким, и затем обратно. Такой процесс является самоповторяющимся, приводя к устойчивым колебаниям.

Попытка дать количественное обоснование этих представлений встречает ряд трудностей, с которыми мы не сталкивались при рассмотрении твердого тела, когда можно было разлагать потенциальную энергию в ряд по малым смещениям. Здесь такой подход уже неприменим. Тем не менее мы знаем, что в газах и жидкостях существуют звуковые волны, которые соответствуют флуктуациям плотности. Это подсказывает нам другой подход к построению теории. Запишем микроскопическое выражение для малых флуктуаций плотности и покажем, что оно в некотором приближении (случайной фазы) удовлетворяет

¹⁾ См. также R. A. Cowley, *Adv. Phys.*, **12**, 421 (1963); P. C. K. Kwok, *Solid State Physics*, **20**, 214 (1967). — Прим. ред.

классическому простому гармоническому уравнению. При этом используется метод, разработанный Бомом и Пайнсом [26] для изучения плазменных волн в классическом электронном газе. Для простоты сначала предположим, что потенциал взаимодействия может быть разложен в интеграл Фурье. При этом будут выявлены наиболее интересные черты, а обобщение на физически более реалистичные случаи будет дано позже.

а) Уравнение движения для флуктуаций плотности. Выберем гамильтониан в виде

$$H = \frac{1}{2} \sum_i M v_i^2 + \sum_{i < j} V(r_i - r_j), \quad (2.65)$$

для которого уравнения движения имеют вид

$$M \dot{v}_i = - \sum_{j \neq i} \nabla_j (r_i - r_j) = - \frac{k}{\Omega} \sum_{i \neq j} \sum_k i V(k) e^{ik \cdot (r_i - r_j)}. \quad (2.66)$$

В соответствии с методом, намеченным выше, запишем для плотности числа частиц выражение

$$\rho(r) = \sum_i \delta(r_i - r) \quad (2.67)$$

и перейдем к его фурье-образу

$$\rho_k = \int \rho(r) e^{-ik \cdot r} dr = \sum_i e^{-ik \cdot r_i}. \quad (2.68)$$

Дифференцирование по времени дает

$$\dot{\rho}_k = -i \sum_i (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i) e^{-ik \cdot r_i} \quad (2.69)$$

и

$$\ddot{\rho}_k = - \sum_i (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i)^2 e^{-ik \cdot r_i} - i \sum_i \mathbf{k} \cdot \dot{\mathbf{v}}_i e^{-ik \cdot r_i}. \quad (2.70)$$

Для исключения $\dot{\mathbf{v}}_i$ из уравнения (2.70) воспользуемся уравнением движения (2.66); тогда

$$\ddot{\rho}_k = - \sum_i (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i)^2 e^{-ik \cdot r_i} - \frac{1}{M\Omega} \sum_{k'} \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' V(\mathbf{k}') \sum_i e^{i(k' - k) \cdot r_i} \sum_j e^{-ik' \cdot r_j}. \quad (2.71)$$

Теперь нужно использовать какие-либо приближения. Очевидно, что основную трудность представляет последний член в уравнении (2.71). Упростить этот член можно с помощью оценки вкладов различных членов в сумму по k' . При случайному распределении координат частиц (предположение, кото-

рое выполняется для жидкостей и газов, но не для твердых тел) отдельные слагаемые в $\rho_{\mathbf{k}}$ [см. (2.68)] при $\mathbf{k} \neq 0$ более или менее случайно распределены в окрестности нуля. Таким образом, $\rho_{\mathbf{k}}$ является малой величиной при $\mathbf{k} \neq 0$. Однако в последний член правой части уравнения (2.71) входят произведения типа $\rho_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}\rho_{\mathbf{k}'}$. Они малы по сравнению с $\rho_{\mathbf{k}}$, кроме случая, когда $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$ или \mathbf{k}' равны нулю. Второй из этих случаев не имеет для нас значения, так как в выражение входит множитель $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'$. Следовательно, во втором слагаемом правой части (2.71) следует оставить только член с $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$. Это приближение носит название приближения случайных фаз.

Первое слагаемое в правой части (2.71) присутствует и в случае, когда частицы не взаимодействуют. Его можно также представить в более удобной форме с помощью следующих соображений:

1) Для любого фиксированного \mathbf{k} существует много таких векторов \mathbf{r}_i , что величина $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$ будет равна любой наперед выбранной константе (с модулем, не превышающим единицу).

2) Такому поднабору большого числа \mathbf{r}_i можно сопоставить некоторое распределение скоростей полной системы.

3) Для любой скорости \mathbf{v}_i из этого поднабора ориентация ее θ_i относительно направления \mathbf{k} случайна. Отсюда получаем

$$\sum' v_i \cos^2 \theta_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} = \frac{1}{3} \bar{v^2} \sum' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}, \quad (2.72)$$

где \sum' означает сумму по всем возможным поднаборам, определенным в п. 1, а $\bar{v^2}$ — средний квадрат скорости системы. Множитель $\frac{1}{3}$ возникает вследствие суммирования по углам при фиксированной скорости с использованием п. 3. Кроме того, в (2.72) мы заменили суммы квадратов их средним значением, умноженным на число членов. Это допустимо, так как экспоненциальный множитель постоянен для поднабора. Если теперь просуммировать (2.72) по всем поднаборам, то получим

$$\sum_i (\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i)^2 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} = \frac{1}{3} k^2 \bar{v^2} \rho_{\mathbf{k}}. \quad (2.73)$$

Используя (2.73) и приближение случайных фаз, можно представить уравнение (2.71) в виде

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}} = -\omega_{\mathbf{k}}^2 \rho_{\mathbf{k}}, \quad \omega_{\mathbf{k}}^2 = k^2 \left[\frac{1}{3} \bar{v^2} + \frac{\rho}{M} V(\mathbf{k}) \right]. \quad (2.74)$$

Необходимо отметить, что в последнем уравнении ρ является макроскопической средней плотностью N/Ω ; ее не следует путать с локальной плотностью (2.67). Как и следовало ожидать,

полученное уравнение является колебательным уравнением. При больших длинах волн оно дает характерный линейный спектр фононного типа:

$$\omega_{\mathbf{k}} \sim ck, \quad c = \left[\frac{1}{3} \bar{v}^2 + \frac{\rho}{M} V(0) \right]^{1/2}, \quad (2.75)$$

где c — скорость звука.

Найденное выражение для c по сути дела совпадает с классическим значением скорости звука, полученным из уравнения состояния с помощью теории возмущений для малых V (включая случай потенциала твердой сердцевины), которая дает

$$c^2 = \frac{1}{\beta M} \left[1 + \rho \int_0^\infty (1 - e^{-\beta V(r)}) 4\pi r^2 dr + \dots \right], \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (2.76)$$

В случае „мягкого“ потенциала экспоненту можно разложить в ряд, откуда следует

$$c^2 = \frac{k_B T}{M} + \frac{\rho}{M} V(0) + \dots \quad (2.77)$$

в соответствии с (2.75). Отсюда вытекает, что, по-видимому, с помощью более тщательного анализа уравнения (2.71) можно получить члены высших порядков в (2.77), необходимые для восстановления по (2.77) общего соотношения (2.76). Такая операция могла бы служить еще одним примером применения развитого ранее (см. гл. 5 и 6) метода суммирования бесконечного ряда расходящихся членов, дающего сходящуюся сумму. При этом обычно потенциал твердой сердцевины заменяется некоторым более мягким потенциалом, затем вычисляются члены ряда и ряд суммируется. После этого совершается предельный переход к потенциальну твердой сердцевины.

б) Пределы применимости классической теории. Поскольку мы пользуемся классической теорией, необходимо выяснить границы ее применимости к реальным жидкостям. Сделать это можно с помощью следующего весьма грубого рассуждения. Рассмотрим атом (или молекулу), движущийся в жидкости, причем средняя длина свободного пробега имеет порядок $\rho^{-1/3}$. Такое движение очень напоминает движение в кубической полости со стороной $\rho^{-1/3}$, где энергетические уровни отстоят друг от друга на расстоянии $\hbar^2 \rho^{2/3}/M$. Если эта величина очень мала по сравнению с $k_B T$, то можно считать, что энергетические уровни образуют сплошной спектр. Тогда применима классическая физика. Такой критерий с достаточной степенью точности применим, вообще говоря, к большинству жидкостей. Впрочем, имеются и исключения; к ним относятся жидкости,

состоящие из легких атомов или молекул — водорода, неона или гелия и находящиеся при низких температурах. Наиболее интересным из них является жидкий гелий, который остается в жидким состоянии (при нормальном давлении) вплоть до $T = 0$, так что в его свойствах очень сильно проявляются квантовые эффекты. Изотоп He^3 образует ферми-систему, которую мы изучали в гл. 5, а He^4 представляет собой бозе-систему, изучению которой будет посвящена почти вся оставшаяся часть настоящей главы.

б) *Функция $S(\mathbf{K}, \omega)$ в жидкостях.* Как мы видели в п. 3, в, структурный фактор $S(\mathbf{K})$ жидкостей, который может быть определен экспериментально путем изучения рассеяния нейтронов или рентгеновских лучей, связан с корреляционной функцией Ван Хова $S(\mathbf{K}, \omega)$ соотношением

$$S(\mathbf{K}) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{K}, \omega) d\omega. \quad (2.78)$$

Недавно были получены новые сведения о силах, действующих между атомами или ионами в простых классических жидкостях и газах, типа аргона и жидкого натрия [106]. Теперь задача состоит в конкретном вычислении $S(\mathbf{K}, \omega)$ по заданному виду двухчастичного потенциала $V(r)$. Для жидкостей такая задача имеет совершенно иной характер и, по-видимому, сложнее, чем в случае твердого тела (см. п. 3, в), где можно было пользоваться разложением по малым смещениям атомов от положений равновесия в решетке. Общая теория для мягких потенциалов [в данном случае $V(r)$ таковым не является!], использующая метод функций Грина, излагается в гл. 10, § 8–10.

Тем не менее можно получить некоторые общие результаты для моментов функции $S(\mathbf{K}, \omega)$ относительно ω , используя только предположение о том, что двухчастичный потенциал взаимодействия не зависит от скорости (хотя для реальных жидкостей существуют на этот счет некоторые сомнения [169]). В этом случае в классическом приближении выведенная в гл. 5 теорема о моментах $S(\mathbf{K}, \omega)$ приобретает вид

$$\overline{\omega^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 S(\mathbf{K}, \omega) d\omega = \frac{k_B T K^2}{M} \quad (2.79)$$

и

$$\begin{aligned} \overline{\omega^4} &= \int_{-\infty}^{\infty} \omega^4 S(\mathbf{K}, \omega) d\omega = \\ &= \frac{K^4 k_B T}{M^2} \left(3k_B T + \int d\mathbf{r} g(r) \left[\frac{1 - \cos Kx}{K^2} \right] \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right), \end{aligned} \quad (2.80)$$

где $g(r)$ — парная функция распределения для жидкости или газа.

Мы не будем приводить доказательство последнего результата, его можно найти в оригинальной работе Плачека [165] или в более простой форме в работе Де Жена [51].

Далее, рассматривая флуктуации плотности, получаем

$$S(0) = k_B T \rho K_T, \quad (2.81)$$

где K_T — изотермическая сжимаемость.

До недавнего времени считалось, что функцию $S(K)$ можно разложить в ряд Тейлора по степеням K^2 :

$$S(K) = S(0) + s_1 K^2 + s_2 K^4 + \dots \quad (2.82)$$

Такое разложение возможно, если $g(r)$ на больших расстояниях убывает экспоненциально, однако недавно было показано следующее [59].

1) В жидкостях типа аргона, в которых действуют силы Van der Waальса, вдали от критической точки корреляционная функция $g(r) - 1$ убывает с расстоянием так же, как и межмолекулярные силы, т. е. пропорционально r^{-6} , откуда следует, что $S(K)$ содержит член, пропорциональный K^3 [см. (3.47)]. Тогда функция $S(K)$ не будет аналитической по K^2 в начале координат в отличие от разложения (2.82). Это наводит на мысль, что многие классические модели, в которых $S(K)$ предполагается функцией от K^2 , не могут служить хорошим приближением [108].

2) В металлических жидкостях типа жидкого натрия электронная теория экранирования (см. гл. 5, § 2) приводит к соотношению

$$V(r) \approx \frac{\cos 2k_f r}{r^3}$$

(в более общем случае с добавлением фазового множителя), которое определяет вид парной функции $g(r)$. При этом функция $S(K)$ становится неаналитической в точке $K = 2k_f$ и принимает вид (см. гл. 5, § 2)

$$S(K) = S(2k_f) + \text{const} \cdot (K - 2k_f) \ln |K - 2k_f|. \quad (2.83)$$

Перечислив эти наиболее общие положения для классических жидкостей, перейдем, наконец, к простому исследованию Фейнмана и Коэна [66], с помощью которого были получены формулы (2.79) и (2.81). Как мы увидим ниже, этот подход тесно примыкает к фейнмановской теории жидкого гелия. Основная идея состоит в том, что при рассмотрении длинноволновых возмущений жидкость можно считать сжимаемой

сплошной средой. Это позволяет, как и раньше, использовать введенные выше флуктуации плотности в качестве нормальных координат. Если при этом плотность числа частиц $\rho(r)$ (2.67) и ее фурье-образ (2.68) определяются в приближении случайных фаз [см. (2.74) и (2.75)], то мы имеем

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{M}{N K^2} [\dot{\rho}_{\mathbf{k}} \dot{\rho}_{\mathbf{k}}^* + \omega_{\mathbf{k}}^2 \rho_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}^*]. \quad (2.84)$$

Теперь воспользуемся полученным в п. 3, в результате, согласно которому функция $S(K)$ равна умноженному на $1/N$ среднему значению $|\rho_{\mathbf{k}}|^2$. Так как для гармонического осциллятора средние значения потенциальной и кинетической энергии равны между собой, имеем

$$S(K) = \frac{\langle E_{\mathbf{k}} \rangle}{Mc^2}, \quad (2.85)$$

где $\langle E_{\mathbf{k}} \rangle$ — средняя энергия осциллятора, соответствующего звуковой волне с волновым вектором \mathbf{K} .

При квантовании выражения (2.84) следует иметь в виду, что осциллятор, представляющий фонон с волновым вектором \mathbf{K} , может находиться в n -м возбужденном состоянии E_n с вероятностью, пропорциональной $e^{-E_n/k_B T}$, где T — температура системы. Тогда с помощью формулы Планка для средней энергии

$$\langle E_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega_{\mathbf{k}} + \frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{e^{\beta \hbar \omega_{\mathbf{k}}} - 1} = \frac{1}{2} \hbar c K \operatorname{cth} \frac{\beta \hbar c K}{2} \quad (2.86)$$

получаем

$$S(K) = \frac{\hbar K}{2Mc} \operatorname{cth} \frac{\beta \hbar c K}{2}, \quad (2.87)$$

где $\beta = 1/k_B T$.

К этому результату мы вернемся в § 3, а здесь отметим сразу, что $\operatorname{cth} x \sim 1/x$ для малых x , откуда

$$\lim_{K \rightarrow 0} S(K) = \frac{1}{\beta Mc^2}. \quad (2.88)$$

Используя соотношение между скоростью звука и сжимаемостью, получаем (2.81).

Хотя излагаемая теория и является длиниоволновым приближением, мы можем исследовать корреляционную функцию Ван Хова, воспользовавшись тем, что в этой модели функции

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = \rho_{\mathbf{k}}(0) e^{i \omega_{\mathbf{k}} t} \quad \text{или} \quad \rho_{\mathbf{k}}(t) = \rho_{\mathbf{k}}(0) e^{-i \omega_{\mathbf{k}} t}, \quad (2.89)$$

являются решениями уравнений движения Гейзенберга. Поскольку функция $S(\mathbf{K}, t)$ определяется соотношением

$$S(\mathbf{K}, t) = \frac{1}{N} \langle \rho_{\mathbf{K}}(0) \rho_{-\mathbf{K}}(t) \rangle, \quad (2.90)$$

можно взять линейную комбинацию решений (2.89) и обобщить соотношение (2.87) следующим образом:

$$S(\mathbf{K}, \omega) = \frac{\hbar K}{2Mc} \operatorname{ctn} \frac{\beta \hbar c K}{2} [a \delta(\omega - cK) + b \delta(\omega + cK)], \quad (2.91)$$

где принято, что $a + b = 1$ для того, чтобы выполнялось (2.78). С учетом принципа детального равновесия $S(\mathbf{K}, \omega) = e^{\hbar \beta \omega} S(\mathbf{K}, -\omega)$ находим

$$a = -\frac{e^{\beta \hbar \omega}}{1 - e^{\beta \hbar \omega}}, \quad b = \frac{1}{1 - e^{\beta \hbar \omega}}. \quad (2.92)$$

Если взять второй момент функции (2.91) относительно ω , то в пределе $\hbar \rightarrow 0$ или $\beta \rightarrow 0$ получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 S(\mathbf{K}, \omega) d\omega = \frac{K^2}{\beta M}. \quad (2.93)$$

Таким образом, при классических условиях мы пришли к соотношению (2.79), однако необходимо еще раз подчеркнуть, что рассматриваемая теория пригодна только для малых K . В частности, нельзя ожидать, что она даст правильное предельное значение $S(K) \rightarrow 1$ для $K \rightarrow \infty$.

§ 3. ЖИДКИЙ Не⁴

Перейдем теперь к теории бозе-систем со слабым взаимодействием между частицами, как это было определено в § 1. В этом случае учитывается лишь влияние взаимодействия на поведение совокупности совершенно независимых бозонов. В связи с этим сначала необходимо исследовать свойства таких идеальных систем.

1. Идеальный газ Бозе — Эйнштейна

В идеальном газе Бозе — Эйнштейна частицы не взаимодействуют между собой, и уравнение Шредингера имеет простой вид

$$T\Phi \equiv -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i^N \nabla_i^2 \Phi = E\Phi. \quad (3.1)$$

Легко получить его нормированные решения. Имеем

$$\Phi = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} S \varphi_{k_1}(r_1) \varphi_{k_2}(r_2) \dots \varphi_{k_N}(r_N); \quad (3.2)$$

$$\varphi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ik \cdot r},$$

где символ S означает, что произведение симметризовано путем суммирования по всем различным перестановкам r_i (или k_i , что то же самое), а N_i — число одинаковых индексов k_i . Соответственно энергия E является суммой одночастичных энергий $E_k = \hbar^2 k^2 / 2M$

$$E = \sum_{i=1}^N E_{k_i}. \quad (3.3)$$

В основном состоянии системы энергия (3.3) минимальна, чему соответствует равенство нулю всех k_i . При этом каждая частица находится в состоянии покоя. В возбужденных состояниях появляются отличные от нуля индексы k_i , а энергия возбуждения равна полной энергии (3.3).

Если a_k^\dagger и a_k — операторы рождения и уничтожения в представлении вторичного квантования, относящиеся к одночастичным уровням $\varphi_k(r)$, то оператор кинетической энергии имеет вид

$$T = \sum_k E_k a_k^\dagger a_k. \quad (3.4)$$

Из вышесказанного с очевидностью следует, что E_k есть спектр элементарных возбуждений системы в смысле определения, данного в гл. 1, § 11. Чтобы формально убедиться в этом и установить явную связь с формулой (1.11.1), достаточно указать, что, поскольку $E_0 = 0$, полный гамильтониан (3.4) принимает вид

$$T = \sum_{k \neq 0} E_k a_k^\dagger a_k. \quad (3.5)$$

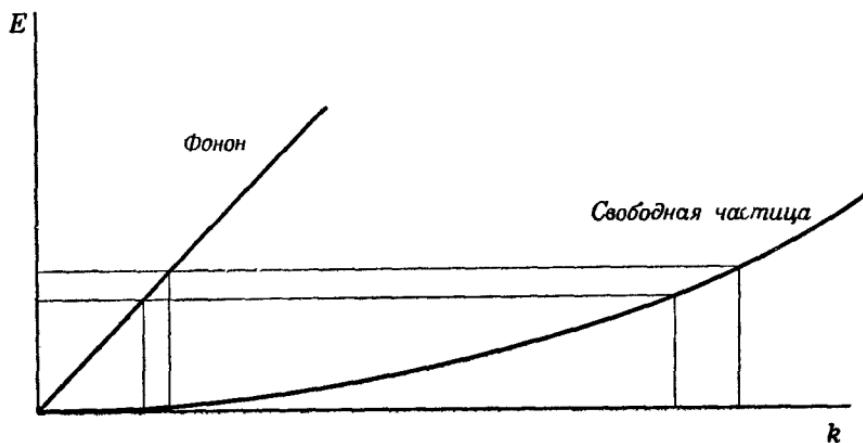
При этом величины E и $H_{\text{кв. ч. вэ}}$ в соотношении (1.11.1) равны нулю, а $H_{\text{кв. ч}}$ определяется правой частью соотношения (3.5). Квазичастица представляет собой возбужденную частицу бозегаза. Квазичастицы могут появляться и исчезать поодиночке. Импульсы и энергии элементарных возбуждений аддитивны в смысле гл. 1, § 11. На фиг. 81 показан параболический спектр возбуждений свободных частиц. Для дальнейшего полезно отметить, что для такого спектра, наклон которого обращается в нуль в окрестности начала координат, любому наперед заданному интервалу значений энергии соответствует очень большое

число низколежащих возбужденных состояний. Таким свойством не обладает линейный фононный спектр (см. § 2), где число возможных низколежащих возбужденных состояний значительно меньше.

Для удобства дальнейшего изложения приведем также следующее соотношение:

$$a_k^\dagger a_0 \Phi \sim \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \Phi \quad (\mathbf{k} \neq 0), \quad (3.6)$$

в справедливости которого нетрудно убедиться непосредственно, если Φ определяется соотношением (3.2). Когда $\Phi = 1$, т. е.



Фиг. 81. Спектр возбуждений фононов и свободных частиц.

является волновой функцией основного состояния, волновая функция (3.6) соответствует элементарному возбуждению частицы из состояния с нулевым импульсом в состояние \mathbf{k} .

Низкотемпературные термодинамические свойства. При нулевой температуре все частицы находятся в состоянии с нулевым импульсом, однако при повышении температуры число частиц в этом состоянии становится все меньше и меньше и наконец при некоторой температуре вырождения T_0 число заполнения состояния с нулевым импульсом перестает быть макроскопическим. Интуитивно это кажется вполне разумным. Переходим теперь к количественному рассмотрению чисел заполнения квазичастиц на основе формулы (1.1). Обычным методом определяем полное число квазичастиц

$$N_{\text{кв. ч.}} = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = \int_0^{\infty} \frac{g(E)}{e^{\beta E} - 1} dE \quad (3.7)$$

и полную энергию .

$$E_{\text{кв.ч}} = \sum_k E_k n_k = \int_0^{\infty} \frac{E g(E)}{e^{\beta E} - 1} dE, \quad (3.8)$$

где $g(E) dE$ — число разрешенных состояний с энергиями, лежащими в интервале $(E, E + dE)$. В рассматриваемом случае, когда $E_k = \hbar^2 k^2 / 2M$, имеем

$$g(E) = \lambda E^{1/2}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{\hbar^3} \Omega (2M)^{3/2}. \quad (3.9)$$

Подставляя (3.9) в (3.7), получаем

$$N_{\text{кв.ч}} = \lambda (k_B T)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^x - 1}. \quad (3.10)$$

Температура вырождения T_0 определяется условием $N_{\text{кв.ч}} = N$. Соотношение (3.10) можно выразить через T_0 :

$$N_{\text{кв.ч}} \equiv N \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}. \quad (3.11)$$

Число заполнения основного состояния получается просто путем вычитания этого выражения из полного числа частиц

$$N - N_{\text{кв.ч}} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right]. \quad (3.12)$$

Изменение числа заполнения основного состояния с температурой изображено на фиг. 82.

Мы видим, что при температурах ниже T_0 число заполнения основного состояния становится макроскопическим. Такое скопление частиц в состоянии с нулевым импульсом представляет собой явление конденсации Бозе — Эйнштейна; состояние с нулевым импульсом иногда называют конденсатом.

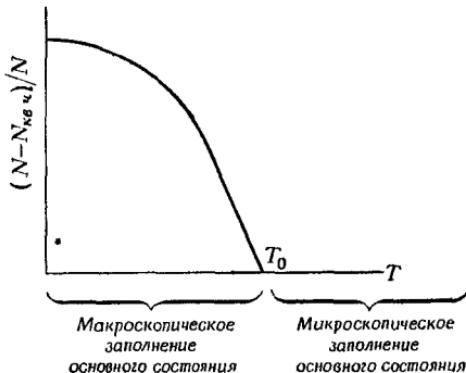
Объединяя (3.9) и (3.8), находим

$$E_{\text{кв.ч}} = \lambda (k_B T)^{1/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^x - 1}. \quad (3.13)$$

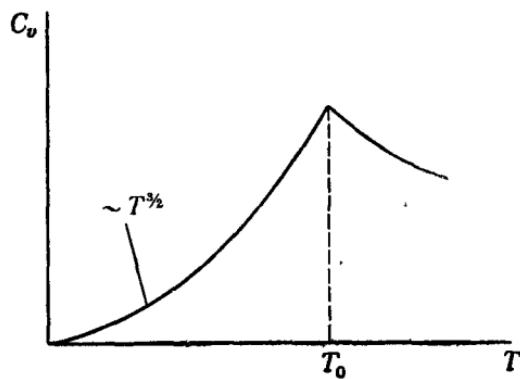
Это выражение позволяет вычислить различные термодинамические свойства; например, зависимость теплоемкости от температуры имеет вид $C_v \sim T^{3/2}$. Следует отметить, что зависимость C_v от T содержит информацию о плотности допустимых низколежащих состояний. Например, если бы энергия E_k имела такой же вид, как в случае линейного фононного спектра, и, следовательно, число допустимых состояний было бы меньше

(см. фиг. 81), то зависимость теплоемкости от температуры подчинялась бы закону Дебая $C_v \sim T^3$.

При температурах выше T_0 простое представление о рождении квазичастицы уже неприменимо, так как дальнейшее образование квазичастиц (из конденсата, который теперь полностью



Фиг. 82. Заполнение основного состояния для бозе-газа.



Фиг. 83. Кривая теплоемкости.

опустошен) уже невозможно. Соответственно вместо (1.1) будем иметь соотношение

$$n_k = \{e^{\beta [E(k) - \mu]} - 1\}^{-1}, \quad (3.14)$$

где химический потенциал μ определяется из условия выполнения нормировочного соотношения

$$\sum_k n_k = N. \quad (3.15)$$

Таким образом, с помощью обычных методов можно получить кривую теплоемкости, изображенную на фиг. 83 (см. также исследование ферми-системы в гл. 5, § 11, п. 1).

2. Включение взаимодействия

Исследуем теперь изменения, происходящие при включении взаимодействия в идеальном бозе-газе. Гамильтониан принимает вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{i < l} V(\mathbf{r}_{il}). \quad (3.16)$$

Если фурье-образ потенциала V существует, то (3.16) можно представить следующим образом:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle a_{\mathbf{k}'_1}^+ a_{\mathbf{k}'_2}^+ a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_1}. \quad (3.17)$$

На самом деле при определенных условиях гамильтониан может быть записан в такой форме даже в случае потенциала твердой сердцевины [98].

Включение взаимодействия сопровождается возбуждением частиц из конденсата, которое продолжается до тех пор, пока через некоторое время не установится стационарный баланс. При этом не ясно, как зависит уменьшение числа заполнения конденсата от вида потенциала V . По аналогии с тепловыми возбуждениями можно полагать, что в случае достаточно малых возмущений число заполнения конденсата остается макроскопическим. Имеются доказательства, подтверждающие это предположение даже для случая сильного взаимодействия между атомами в жидком Не II (см., например, книгу Хуанга [98], стр. 415 и работу Пенроуза и Онсагера [160]).

Это позволяет нам, когда понадобится (в п. 7), считать, что число заполнения состояния с нулевым импульсом есть $O(N)$, а все другие числа заполнения — $O(1)$. Необходимо заметить, что могут существовать и другие варианты. В частности, Лубан [134] обратил внимание на возможность существования „размазанной“ бозе-энштейновской конденсации, при которой в некоторой окрестности начала координат \mathbf{k} -пространства среднее заполнение k -го состояния имеет величину $O(N^x)$, где x — число, зависящее от \mathbf{k} и меняющееся от 0 до 1. Исследования, проведенные до сих пор, показывают, что такое предположение приводит к весьма разумным результатам.

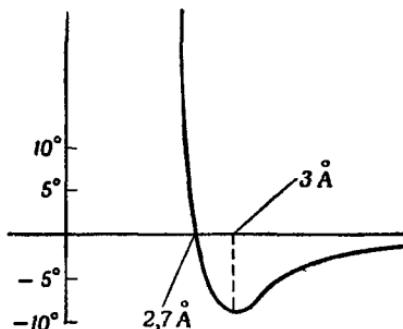
3. Основные феноменологические результаты

Для дальнейшего рассмотрения полезно дать здесь краткий обзор некоторых свойств гелия.

1) Кривая потенциала взаимодействия между атомами Не, вычисления Слэтером и Кирквудом [189], приведена на фиг. 84.

Основными ее характеристиками являются: во-первых, твердая отталкивательная сердцевина, соответствующая диаметру атома с размером $\sim 2,7 \text{ \AA}$, во-вторых, „хвост“, соответствующий слабому ван-дер-ваальсовскому притяжению.

2) Гелий переходит из газообразного состояния в жидкое при температуре около $4,2^\circ\text{K}$ и остается жидким вплоть до самых низких температур, какие удалось получить (при давлениях не выше 25 atm). Причинами такого исключительного по-



Фиг. 84. Потенциал взаимодействия между атомами Не.

ведения являются а) малая масса атома, что приводит к сравнительно большой энергии нулевых колебаний; б) сравнительно слабое ван-дер-ваальсовское притяжение; в силу обеих причин решетки любых конфигураций оказываются неустойчивыми.

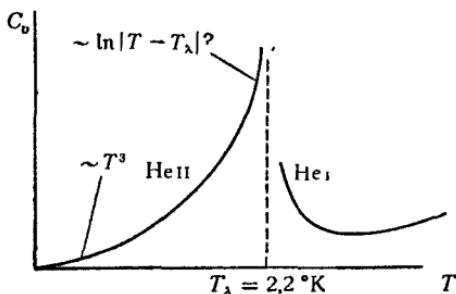
У других элементов не выполняются либо одно, либо оба этих необходимых требования. Так, у инертных газов (кроме гелия) ван-дер-ваальсовское притяжение мало, но слишком велика атомная масса. Наоборот, у водорода масса атома мала, но слишком велики межмолекулярные силы.

В силу причин „а“ и „б“ жидкий гелий имеет большой удельный объем ($\sim 46 \text{ \AA}^3$ на атом), чему соответствует среднее межатомное расстояние порядка $3,6 \text{ \AA}$.

3) Если продолжать охлаждать жидкий Не, то при температуре $2,2^\circ\text{K}$ с ним произойдет замечательное превращение. Это превращение легко заметить визуально, так как выделение пузырьков из жидкости внезапно прекращается, и она становится совершенно спокойной. На фиг. 85 показано изменение теплоемкости при этом превращении, которое называется λ -точкой и отвечает температуре T_λ . Переход, несомненно, связан с конденсацией Бозе — Эйнштейна, рассмотренной в п. 1. Например, температура T_0 , определенная для значений массы атома и плотности, соответствующих He^4 , оказывается равной

3,2° К, тогда как экспериментальное значение T_λ равно 2,2° К. Дополнительным подтверждением является отсутствие такого перехода у ферми-жидкости Не³.

a) **Жидкий Не II.** Жидкий гелий при температурах выше T_λ , так называемый Не I, является совершенно нормальной жидкостью. В дальнейшем наша основная задача будет состоять в объяснении некоторых низкотемпературных свойств неподвижного (или в крайнем случае очень медленно движущегося) жидкого Не II, образующегося при температурах ниже T_λ . Ввиду таких ограничений мы не рассматриваем две сложные



Фиг. 85. Зависимость теплоемкости C_v от температуры для жидкого гелия.

и пока еще не решенные проблемы, а именно вопрос о термодинамических свойствах системы вблизи λ -точки и вопрос о возбуждениях, образующихся в движущейся жидкости (см. по этому поводу работы Браута [31] и Фейнмана [65]). Чтобы не задерживаться слишком долго на рассмотрении различных макроскопических свойств Не II, просто дополним настоящее изложение перечислением ряда его свойств.

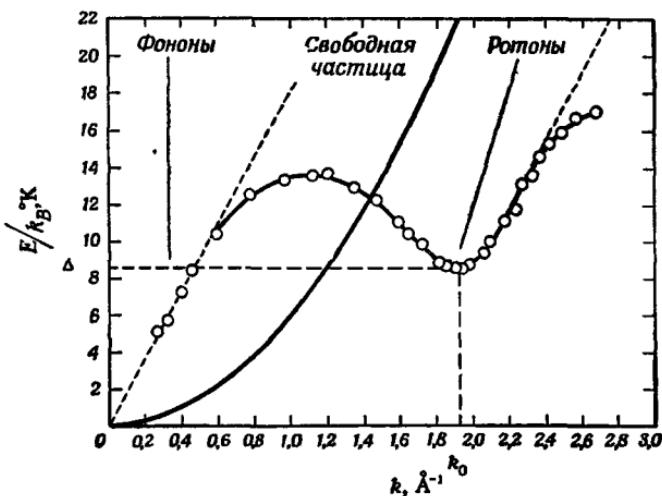
1) Не II является сверхтекучим. Это означает, что при протекании по узким капиллярам он не испытывает сопротивления. Если же вязкость измеряется с помощью диска, врашающегося в жидкости, то получается малая величина, не равная нулю.

2) Не II обладает исключительно высокой теплопроводностью. Скорость переноса тепла в нем уже не подчиняется обычной теории, согласно которой она пропорциональна градиенту температуры, и настолько высока, что Не II вполне можно называть тепловым сверхпроводником [137]. Именно этим обстоятельством объясняется наличие λ -точки. Действительно, в жидком Не I перенос тепла осуществляется за счет процесса кипения, как и в любой другой нормальной жидкости вблизи точки кипения, но как только совершается переход в Не II, этот механизм становится излишним.

3) В жидким Не II могут распространяться ярко выраженные тепловые волны. В некотором отношении они аналогичны обычным звуковым волнам (волнам давления). Это явление, которое носит название „второй звук“, было предсказано теоретически Ландау (см., например, монографии Ф. Лондона [133] и Халатникова) и подтверждено экспериментальными исследованиями Пешкова [161].

4. Двухжидкостная модель и спектр Ландау

Перечисленные выше экспериментальные факты можно объяснить с помощью двухжидкостной модели, которую предложили Лондон, Тисса и Ландау (см., например, [133]). В основном можно считать, что эта модель основана на понятии элементарных возбуждений и квазичастиц, которые изучались



Фиг. 86. Спектр Ландау элементарных возбуждений в гелии.

в гл. 1, § 11. Выше уже говорилось о том, что при возрастании температуры от абсолютного нуля образуется „газ“ квазичастиц. Таким образом, мы приходим к идею о двух взаимопроникающих жидкостях: компоненте из конденсатных частиц (которую далее мы будем называть сверхтекучей, поскольку, как мы увидим ниже, она действительно является таковой) и нормальной компоненте квазичастиц.

а) **Фононы.** Как мы уже убедились выше, вид спектра $E(k)$ полностью определяет термодинамические свойства системы при низких температурах. Ландау сумел найти такую форму кривой $E(k)$ (типа изображенной на фиг. 86), которая позво-

ляет объяснить экспериментальные данные. При малых k зависимость близка к линейной

$$E = ck, \quad (3.18)$$

где c — скорость звука в жидком гелии. В этой области квазичастицы, очевидно, представляют собой фононы, как и следовало ожидать согласно классической теории, рассмотренной в § 2, п. 5. Обладая наименьшей энергией, фононы преобладают при низких температурах и позволяют объяснить дебаевский закон T^3 изменения теплоемкости при температурах ниже $0,5^\circ\text{K}$.

б) *Ротоны*. С помощью только представления о фононах не удается объяснить увеличение теплоемкости, наблюдающееся при возрастании температуры, например до 1°K . Это обстоятельство заставило Ландау постулировать еще один тип элементарных возбуждений — ротоны, энергия которых не может быть ниже определенного критического значения Δ . Следовательно, ротоны могут существовать в значительном количестве лишь при температурах выше $0,5^\circ\text{K}$. При более высоких температурах термодинамические свойства системы определяются в основном ротонами [120]. В области ротонного минимума спектр элементарных возбуждений можно описать уравнением

$$E = \Delta + \frac{(k - k_0)^2}{2\mu}. \quad (3.19)$$

Вооруженные всеми изложенными выше (особенно в § 2, п. 5) сведениями, мы теперь имеем некоторое интуитивное представление о фононах. Мы полагаем, что фононы возникают в теории при квантовании элементарных флуктуаций плотности. Однако для ротонов у нас еще нет подобной теории. Фактически этот вопрос до настоящего времени остается неясным, хотя и существуют различные важные качественные соображения, выдвинутые Фейнманом и Коэном [65, 66]. Чтобы удовлетворить любопытство читателя, укажем, что, согласно предположению Фейнмана, возникновение ротонов в отличие от фононов происходит в результате локализованных возмущений. Эти возмущения затрагивают только несколько атомов и образуют квантованное вихревое кольцо с радиусом порядка половины межатомного расстояния. Дальнейшая детализация модели невозможна, так что классическое описание распространения вихря в сверхтекучей жидкости (подобно кольцу дыма) не годится. Именно этим объясняется малая групповая скорость ротонов, равная dE/dk , вблизи точки $k = k_0$. Следует также указать, что вопреки названию нет оснований полагать, что ротоны фактически обладают моментом количества дви-

жения. К счастью, значительных успехов удалось достичь без использования детальных предположений подобного рода¹⁾.

При импульсах, лежащих выше ротонной области, спектр возбуждений становится параболическим и несколько напоминает одночастичный спектр идеального бозе-газа (см. п. 1). Если импульс возбуждения достаточно велик, то, как будет показано в гл. 10, такое возбуждение становится неустойчивым и распадается на несколько возбуждений с меньшими импульсами и энергиями. Однако при интересующих нас здесь низких температурах квазичастицы, лежащие вне фононной и ротонной областей, не имеют большого значения, так как для их возбуждения, нужна относительно высокая энергия.

Наконец, укажем, что в настоящее время эксперименты по дифракции нейтронов позволяют гораздо точнее установить форму спектра Ландау, чем термодинамические данные. Как подчеркивалось ранее, анализ Ван Хова (см. п. 3, в) является совершенно общим; в частности, он справедлив и для жидкостей. Используя этот формализм, Коэн и Фейнман [44] показали, что для медленных нейтронов при достаточно низких температурах можно получить результат, совершенно аналогичный найденному в § 2, п. 3, г для твердого тела. Этот результат заключается в том, что рассеяние на фиксированный угол обусловлено рождением или уничтожением отдельного возбуждения, а множественные процессы дают вклад только в диффузный фон. (Кроме того, нетрудно показать, что такой механизм рассеяния является единственным, так как упругое рассеяние в жидкости фактически невозможно.)

На фиг. 86 приведен график, построенный на основании исследования дифракции нейтронов, проведенных Хеншоу и Вудсом [95]²⁾. Они получили, что $c = 237 \text{ м/сек}$, $\Delta/k_B = 8,6(5)^\circ\text{K}$, $k_0 = 1,91 \text{ \AA}^{-1}$ и $\mu/M = 0,16$, где M — масса атома He^4 . Отметим, что даже при наибольших значениях k , при которых проводились измерения, экспериментальный график отклоняется от асимптотической кривой. По-видимому, это будет иметь место и при дальнейшем увеличении k . Ниже в п. 6, г мы увидим, что ротонный минимум очень тесно связан с первым пиком на кривой $S(k)$; вероятно, наблюдавшееся Хеншоу и Вудсом поведение спектра при больших k связано со вторым пиком $S(k)$.

¹⁾ Спектр элементарных возбуждений типа показанного на фиг. 86 микроскопически впервые был получен Н. Н. Боголюбовым [23] для модели слабо неидеального бозе-газа без каких-либо предположений о ротонах (см. § 7). — Прим. ред.

²⁾ См. также работы Вудса и Каули в Трудах конференции 1968 г. (см. примечание на стр. 306). — Прим. ред.

5. Спектр Ландау и макроскопические свойства

Как уже отмечалось, спектр Ландау позволяет объяснить наблюдаемые термодинамические свойства при низких температурах. Он согласуется и с другими экспериментальными результатами. Ниже мы ограничимся качественным объяснением свойств, описанных в п. 3, и лишь потом перейдем к нашей основной задаче: выводу спектра Ландау из первых принципов.

a) Второй звук. Начнем с того, что попытаемся объяснить аномально высокую теплопроводность с помощью двухжидкостной модели. Когда к какой-либо части жидкости подводится тепло, плотность квазичастиц в этой области возрастает. Чтобы восстановить равновесие, возникает поток сверхтекущей компоненты жидкости в эту область и поток нормальной жидкости (квазичастиц) из нее. Теплопроводность при этом лимитируется только скоростью этих потоков; такой механизм значительно эффективнее обычного механизма теплопроводности, пропорциональной градиенту температуры. Совершенно также второй звук можно интерпретировать как колебания плотности числа квазичастиц. Локальное повышение температуры приводит к соответствующему локальному возрастанию плотности квазичастиц и возникновению потока сверхтекущей компоненты жидкости, направленного в эту область. В результате в соседних областях увеличивается плотность нормальной жидкости, т. е. квазичастиц и т. д. Таким образом обеспечивается распространение теплового импульса в жидкости с очень малым затуханием.

б) Вязкость. Задачу о вязкости также можно рассмотреть с помощью двухжидкостной модели. Вращающийся объект находится не только в сверхтекущей компоненте жидкости, но и в нормальной компоненте, поэтому испытываемое им сопротивление не равно нулю. С другой стороны, как мы скоро увидим, сверхтекущая компонента жидкости протекает сквозь узкие капилляры, не испытывая сопротивления, при условии, что скорость не слишком велика.

в) Возбуждения и сверхтекучесть. Последний вопрос, который мы намерены рассмотреть, наиболее важен: почему спектр возбуждений типа предложенного Ландау приводит к сверхтекучести? Первоначальные рассуждения Ландау были основаны на использовании преобразования Галилея для различных систем координат. Доказательство, приводимое ниже, принадлежит Беляеву [15].

Предположим, что сначала в жидкости имеется одна квазичастица с импульсом k . Тогда групповая скорость

$$v_g = \frac{\partial E}{\partial k}. \quad (3.20)$$

Теперь предположим, что каждая частица жидкости обладает скоростью u , которая, следовательно, представляет собой макроскопическую скорость жидкости. Тогда полный импульс жидкости будет равен уже не k , а

$$k' = k + M_t u, \quad (3.21)$$

где M_t — полная масса. При этом новая групповая скорость квазичастицы станет равной

$$v_g' = \frac{\partial E'}{\partial k'} = v_g + u. \quad (3.22)$$

Из (3.20) — (3.22) находим соотношение

$$\frac{\partial E'}{\partial k} = \frac{\partial E'}{\partial k'} = \frac{\partial E}{\partial k} + u. \quad (3.23)$$

Интегрируя его по k , получаем

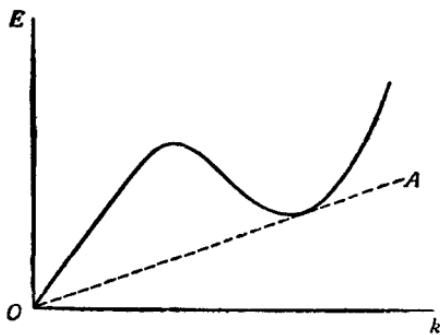
$$E' = E(k) + u \cdot k \quad (3.24)$$

для любых k .

Необходимо отметить, что $E' > 0$ при любых k в том и только в том случае, когда

$$|u| < \frac{E(k)}{k} \quad (\text{при любых } k). \quad (3.25)$$

Минимальное значение отношения $E(k)/k$ определяется наклоном линии OA на фиг. 87. Следовательно, $E' > 0$, если макроскопическая скорость жидкости меньше наклона линии OA .



Фиг. 87.

Выполнение условия $E' > 0$ означает, что жидкость энергетически устойчива относительно образования элементарных возбуждений. Иначе говоря, для создания квазичастиц необходимо затратить энергию; в противном случае нормальная жидкость возникнуть не может. Если скорость u слишком велика, то жидкость становится неустойчивой относительно рождения воз-

буждений с отрицательной энергией благодаря минимуму на кривой $E(k)$.

На самом деле оказывается, что кривую спектра Ландау $E(k)$, определенную по термодинамическим данным, нельзя непосредственно использовать для движущейся жидкости. Это связано с тем, что значение критической скорости, найденное из неравенства (3.25) и спектра Ландау, равно Δ/k_0 (см. фиг. 86 и 87), что в несколько сотен раз превышает экспериментальное значение. Чтобы объяснить такое расхождение, Онсагер и Фейнман предположили, что в движущейся жидкости существует еще один тип возбуждений: квантованная вихревая нить. Мы не будем здесь подробно обсуждать этот вопрос. Следует, однако, подчеркнуть, что проведенное рассмотрение указывает на существование сверхтекущего потока при достаточно малых макроскопических скоростях.

Хотя ротонный минимум играет очень важную роль в определении наклона линии OA , не следует забывать о том, что сверхтекучесть жидкости в первую очередь определяется наличием (линейного) фононного участка спектра. Чтобы убедиться в этом, представим себе на некоторый момент, что $E(k) = k^2/2M$, как в идеальном газе (см. фиг. 81). Тогда в (3.24) всегда можно выбрать такое значение k (например, $k = -Mi$), что величина E будет отрицательной. Из геометрических соображений ясно, что любая прямая линия, проходящая через начало координат и имеющая угол наклона, отличный от нуля, пересекает параболу $k^2/2M$ в двух различных точках. Если же в (3.24) $E(k) = ck$, то при $u < c$ такая возможность оказывается неосуществимой для малых k . Можно сказать, что взаимодействие в He II приводит к такому уменьшению числа низколежащих возбуждений (по сравнению с идеальным газом, см. фиг. 81), что оказывается возможной сверхтекучесть.

Как уже отмечалось выше, поведение He II в значительной мере определяется спектром возбуждений Ландау. Нахождение этого спектра, очевидно, и является нашей центральной задачей; приступим теперь к ее решению. К настоящему времени разработаны два подхода, которые оказались успешными. Первый из них принадлежит Фейнману [65], который рассматривал исходную задачу без всяких модификаций. Несмотря на значительные трудности, Фейнману удалось добиться существенных успехов; часть его работы рассматривается ниже. Другой подход состоит в исследовании упрощенной модельной системы, которая отражает некоторые свойства He II . При этом имеется неудобство, состоящее в том, что мы рискуем упустить из виду какие-либо физические свойства системы. Однако переход к соответствующим образом выбранной модифицированной модели

позволяет получить математически более строгое решение и таким образом добиться более глубокого понимания явления. Наиболее известным примером такого рода является задача о слабо неидеальном бозе-газе с притяжением, поставленная в основополагающей работе Боголюбова [23]; она будет рассмотрена в п. 7 (см. также работу Боголюбова и Зубарева [25]).

6. Теория Фейнмана

Прежде всего заметим, что хотя теория Фейнмана и не дает строгих количественных соотношений, можно почти с полной уверенностью считать, что она правильно передает основные физические свойства.

Проблема сводится к исследованию решений уравнения Шредингера с гамильтонианом (3.16) для амплитуды вероятности $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$, симметричной относительно перестановки любой пары координат. Соответствующая энергия равна

$$E = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \int |\nabla_i \Psi|^2 d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N + \sum_{i < j} \int V(r_{ij}) |\Psi|^2 d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (3.26)$$

Это выражение будет использовано ниже.

Потенциал V совпадает с обсуждавшимся в п. 3 потенциалом, изображенным на фиг. 84. Наличие твердой сердцевины у атомов He^4 приводит к тому, что вероятность их наложения очень мала, т. е. для таких конфигураций функция Ψ практически равна нулю. За исключением этого ограничения, приближенно можно считать, что все другие состояния атомов почти равновероятны. Это значит, что атомы равномерно распределены в пространстве, иными словами, локальная макроскопическая плотность постоянна. Поскольку объем, приходящийся на один атом, велик по сравнению с объемом жесткой сердцевины, атомы могут свободно двигаться относительно друг друга, а система может легко переходить из одной конфигурации в другую.

Следующее замечание касается расположения узлов собственных функций. Характерной чертой функции основного состояния Φ является отсутствие узлов, в связи с чем ее можно считать всюду положительной. Далее, волновые функции всех возбужденных состояний ортогональны функции Φ (и друг другу). Это означает, что их действительные и мнимые части должны принимать как положительные, так и отрицательные значения. Переходим теперь к анализу таких состояний.

а) *Флуктуации плотности и волновые функции возбужденных состояний.* Приближенно волновые функции фононов можно

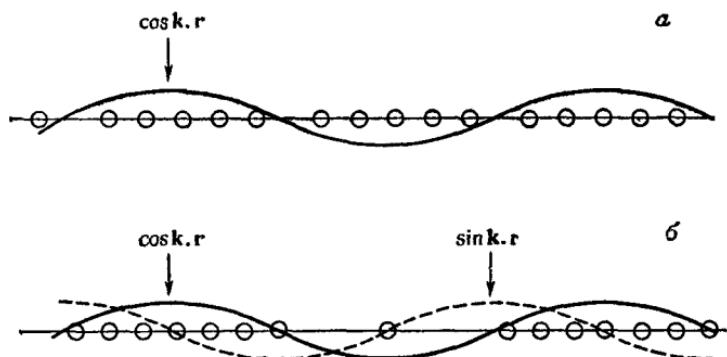
записать с помощью формализма, развитого в § 2, п. 5. При этом в первом приближении получаем, что классические флуктуации плотности ρ_k , определяемые соотношением (2.68), являются нормальными модами для жидкости [см. (2.74)]. Доказательство основано на использовании общепринятого предположения о мягкой сердцевине потенциалов взаимодействия, однако нет особых оснований сомневаться в его справедливости и в более общих случаях. Тогда в приближении случайных фаз можно считать, что осцилляции различных ρ_k являются взаимно независимыми. Низшим возбужденным состоянием простого гармонического осциллятора является просто произведение координаты на функцию основного состояния, имеющую гауссову форму. Отсюда следует, что в рассматриваемом случае (ненормированные) волновые функции фононов можно представить в виде

$$\Psi = \rho_k \Phi = \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \Phi. \quad (3.27)$$

Отметим, что точная волновая функция основного состояния Φ модифицирована с учетом требования о невозможности перекрытия атомов, которое справедливо как для основного, так и для возбужденных состояний. Функция (3.27) обладает необходимыми свойствами симметрии.

Напомним [см. (3.6)], что в случае отсутствия взаимодействия одиночные возбуждения можно записать в виде (3.27), считая, конечно, Φ константой. Тем не менее еще раз повторим, что при малых k функция (3.27) является фононной волновой функцией. Не касаясь вопроса о способе вывода волновой функции типа (3.27), ее физический смысл можно понять следующим образом. Начнем с рассмотрения действительной части. Изобразим схематически функцию $\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ (см. фиг. 88, *a*) и отметим кружочками положения атомов в основном состоянии. Как уже указывалось выше, атомы не могут перекрываться и отстоят, друг от друга на примерно одинаковом расстоянии. Подобный случай изображен на фиг. 88, *a*. При малых k на расстоянии, равном длине волны, находится много атомов. Поскольку они распределены равномерно, сумма $\sum_i \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i$ будет или равна нулю, или очень мала. Существует также некоторая, значительно меньшая вероятность того, что распределение атомов в основном состоянии будет соответствовать изображенному на фиг. 88, *b*. В этом случае в сумме $\sum_i \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i$ будет гораздо больше положительных слагаемых, чем отрицательных, и сумма будет велика. Следовательно, можно сказать, что умножение Φ на

$\sum_i \cos k \cdot r_i$ увеличивает вероятность флюктуаций плотности типа изображенной на фиг. 88, б за счет уменьшения вероятности равномерного распределения. Такой же эффект дает и сумма экспонент, так как из симметрии следует, что сумма $\sum_i \sin k \cdot r_i$ обращается в нуль не только для распределения, изображеного на фиг. 88, а, но и для распределения на фиг. 88, б. Проведенное рассмотрение справедливо до тех пор, пока длина волны не станет сравнимой со средним межатомным расстоянием (см. ниже).

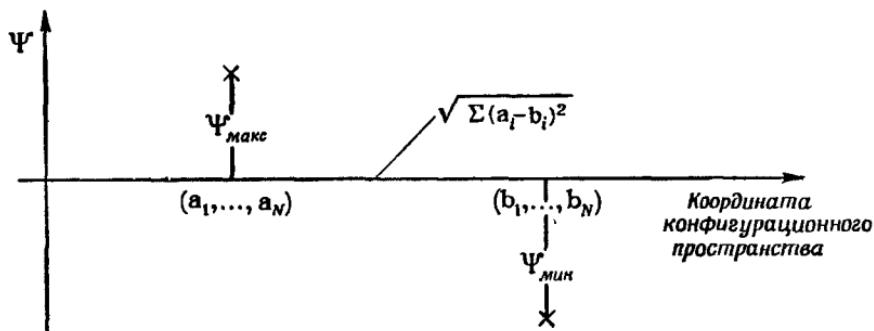


Фиг. 88.

б) *Фононный характер элементарных возбуждений.* Теперь основной нашей задачей является доказательство отсутствия при достаточно малом импульсе каких бы то ни было элементарных возбуждений с энергией более низкой, чем у фононов. Действительно, если в рассматриваемой области существует, например, параболический спектр типа спектра свободной частицы, то в соответствии со сказанным выше (см. п. 5) сверхтекучесть Не II уже будет невозможна. Выше на одном примере мы уже коснулись вопроса о том, что вид статистики может затруднять построение волновой функции возбужденных состояний с малой энергией возбуждения. Здесь можно попробовать описать возбуждения как движение одной частицы сквозь жидкость с неплотной упаковкой, причем другие атомы образуют обратный поток вокруг движущейся частицы. В приближении эффективной массы пробную волновую функцию можно записать в виде $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} \Phi$, где \mathbf{r}_1 — координата возбужденной частицы, а Φ , как и ранее, описывает относительное распределение остальных частиц. Однако в таком виде эта волновая функция нам не подходит. Ее нужно симметризовать, после

чего мы вновь приходим к функции (3.27), которая для малых k соответствует фононам, а не одночастичным возбуждениям. Иначе говоря, существует нижняя граница значений энергии и импульса, ниже которой волновая функция (3.27) не может описывать одночастичные возбуждения, т. е. существует естественная граница для значений k , для которых волновая функция (3.27) может описывать фононы.

Общие соображения состоят в следующем. Попробуем построить нефононное возбужденное состояние с наиболее низкой энергией. Такое состояние не может представлять собой локальное изменение макроскопической плотности, поскольку последнее описывается фононами. Следовательно, интересующее нас состояние должно соответствовать такому движению (перемешиванию по терминологии Фейнмана) атомов в основном

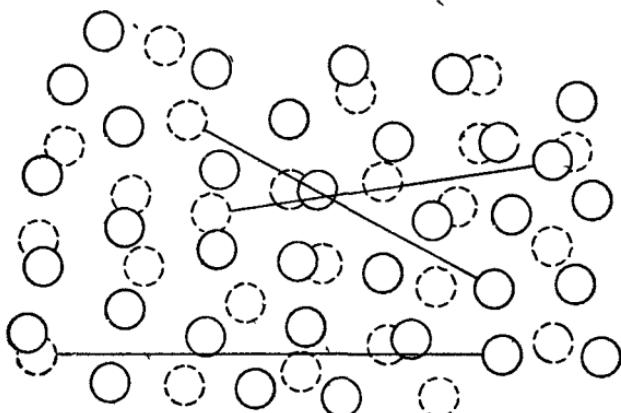


Фиг. 89.

состоянии, при котором не возникает большой разности концентраций атомов в системе. В этом случае распределение частиц влияет на потенциальную энергию системы только через парную функцию распределения (см. гл. 1, § 4, п. 3), а она, согласно вышесказанному, совсем незначительно изменяется при перемешивании. Следовательно, все зависит от члена кинетической энергии в выражении (3.26). Кинетическая энергия в свою очередь зависит от градиента Ψ в конфигурационном пространстве. Покажем теперь, что ортогональность Ψ и Φ в случае статистики Бозе приводит к таким флуктуациям градиента Ψ в конфигурационном пространстве, что энергия обязательно будет превышать энергию основного состояния. (Минимальное возможное значение разности энергий должно быть порядка характерной энергии Δ , необходимой для образования ротона.) Это означает, что энергия фононных состояний всегда будет ниже.

Поскольку и действительная и мнимая части волновой функции Ψ по отдельности удовлетворяют уравнению Шредингера,

мы можем, не теряя общности, предполагать в дальнейшем, что Ψ является действительной функцией. Тогда из свойств ортогональности следует, что функция Ψ имеет узлы, а следовательно, имеет положительное максимальное и отрицательное минимальное значения. Следующая наша задача состоит в доказательстве того, что в конфигурационном пространстве положения этих экстремумов не могут находиться на произвольно большом расстоянии друг от друга.



Фиг. 90. Взаимное расположение атомов, находящихся в положениях, отвечающих конфигурации A (сплошные кружки) и конфигурации B (пунктирные кружки).

Взаимное расположение конфигураций A и B произвольно, необходимо только, чтобы примерно на половине расстояния между атомами конфигурации A находился атом конфигурации B .

Сплошные линии указывают возможные неоптимальные корреляции между атомами конфигураций A и B (см. текст).

Предположим, что функция Ψ имеет максимальное значение при некоторой конфигурации A , где атомы находятся в положениях (a_1, a_2, \dots, a_N):

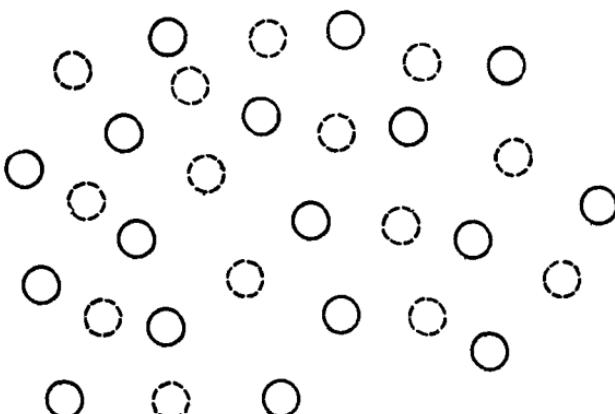
$$\Psi_{\max} = \Psi(a_1, a_2, \dots, a_N), \quad (3.28)$$

а минимальное значение — при конфигурации B , где атомы имеют координаты (b_1, b_2, \dots, b_N):

$$\Psi_{\min} = \Psi(b_1, b_2, \dots, b_N). \quad (3.29)$$

Схематически эти два случая представлены на фиг. 89. Конфигурацию A (в которой, как подчеркивалось выше, локальная макроскопическая плотность постоянна) можно представить в реальном пространстве, как изображено, например, на фиг. 90. То же самое можно сказать и о конфигурации B . Следовательно, конфигурации A и B взаимно перемешаны таким образом, что атомы конфигурации B расположены примерно посе-

редине между атомами конфигурации A и наоборот. Это позволяет нам говорить о близости положений атомов в A и B . Далее, для преобладающего числа конфигураций значение $V \sum (a_i - b_i)^2$ будет очень большим, так как расстояние между хотя бы одной парой a_i , b_i очень велико. Однако для такого набора, у которого a_i и b_i при любых i соответствуют соседним расположениям, расстояние в конфигурационном пространстве будет минимальным¹⁾). Функция Ψ на этом интервале должна изменяться от своего минимального до максимального значения;



Фиг. 91

это требование определяет нижнюю границу плотности кинетической энергии в рассматриваемой области. Наоборот, функция основного состояния не имеет узлов, поэтому к ней неприменимо такое условие. Следовательно, можно ожидать, что состояние рассмотренного выше типа должно быть отделено от основного состояния некоторой минимальной энергией Δ . Из проведенного анализа вытекает, что если фиг. 90 изображает конфигурации, соответствующие максимальной и минимальной амплитудам, то эти конфигурации должны более или менее симметрично проникать друг в друга, т. е. расстояния от положений A до ближайших положений B должны быть порядка половины межатомного, как показано на фиг. 91.

в) Вариационная пробная волновая функция. Возбуждения рассмотренного выше типа представляют собой ротоны. Попытаемся теперь построить соответствующий участок кривой $E(k)$ с помощью приближенных пробных вариационных волновых функций, выбрав их в соответствии с рассуждениями, прове-

¹⁾ Произвольная конфигурация сводится к такому набору путем перестановки атомов. — Прим. перев.

денными выше. Ограничимся сначала рассмотрением только таких конфигураций, при которых каждая частица находится или в положении A , или в положении B . По определению, наиболее вероятными являются такие конфигурации, при которых все положения A заняты, а B свободны. Возможно также (хотя и с меньшей вероятностью), что все атомы находятся в положениях A , кроме одного, который находится в одном из положений B . Менее вероятно, но тем не менее возможно, что все атомы, кроме двух, находятся в положениях A и т. д. Чтобы учесть это, запишем Ψ в виде

$$\Psi = F\Phi, \quad F = \sum_i f(\mathbf{r}_i), \quad (3.30)$$

где функция Φ введена для того, чтобы исключить возможность заметного перекрытия атомов. Мы, очевидно, учтем описанное выше изменение вероятностей, если будем считать, что функция f принимает значение $+1$ для положений A и -1 для положений B . Однако если исследовать такую функцию, то оказывается, что ее можно использовать для описания случаев, когда атом не находится ни в положении A , ни в положении B . В этом случае можно считать, что функция f меняется непрерывно от $+1$ до -1 и принимает для атома, находящегося вблизи положения A , значение, немного меньшее $+1$, а для атома, находящегося между положениями A и B , значение, примерно равное нулю, и т. д.

Точное определение f производится с помощью вариационного принципа. Возьмем гамильтониан системы в виде

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{i < j} V(r_{ij}) - E_0, \quad (3.31)$$

где E_0 — энергия основного состояния. Следовательно,

$$H\Phi = 0. \quad (3.32)$$

Введем обозначения

$$\mathfrak{N} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \quad \mathfrak{D} = \langle \Psi | \Psi \rangle, \quad (3.33)$$

после чего задача сводится к отысканию таких функций f , для которых выражение

$$\epsilon = \frac{\mathfrak{N}}{\mathfrak{D}} \quad (3.34)$$

стационарно. Для этих оптимальных функций ϵ определяет энергию возбуждения.

Из (3.30) — (3.32) получаем

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i (\Phi \nabla_i^2 F + 2V_i \Phi \cdot \nabla_i F) = -\frac{\hbar^2}{2M} \Phi^{-1} \sum_i \nabla_i \cdot (\Phi^2 \nabla_i F);$$

здесь исключена явная зависимость от E_0 и потенциальной энергии. Таким образом, находим

$$\begin{aligned} \mathfrak{R} &= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \int (\nabla_i F^*) \cdot (\nabla_i F) \Phi^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N = \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \int (\nabla_i f^*(\mathbf{r}_i)) \cdot (\nabla_i f(\mathbf{r}_i)) \Phi^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N = \\ &= \frac{\rho \hbar^2}{2M} \int \nabla f^*(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.35) \end{aligned}$$

где мы воспользовались тем, что функция Φ вещественна, и тем, что диагональный элемент одночастичной матрицы плотности равен обычной плотности числа части ρ , т. е. постоянной величине. Кроме того, имеем

$$\begin{aligned} \mathfrak{D} &= \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Phi | F^* F | \Phi \rangle = \langle \Phi | \sum_{ij} f^*(\mathbf{r}_i) f(\mathbf{r}_j) | \Phi \rangle = \\ &= \rho \int f^*(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_2) S(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (3.36) \end{aligned}$$

где $S(\mathbf{r})$ — отнесенная к единице объема вероятность того, что какой-либо атом находится на расстоянии \mathbf{r} от выделенного атома. Таким образом, $S(\mathbf{r})$ совпадает с величиной, определяемой соотношением (2.45). Теперь легко записать уравнение Эйлера для (3.35). Оно имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = \epsilon \int S(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (3.37)$$

Вернемся теперь к исследованию природы элементарных возбуждений, описываемых этим уравнением.

2) *Структурный фактор и спектр возбуждений.* Нетрудно убедиться, что решением уравнения Эйлера (3.37) являются функции

$$f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.38)$$

которым соответствуют энергии

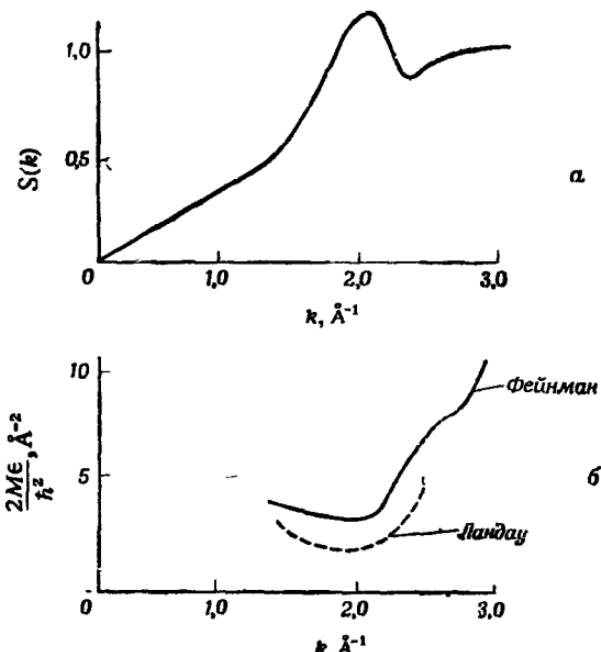
$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2MS(k)}, \quad (3.39)$$

где [ср. (2.44)]

$$S(k) = \int S(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (3.40)$$

Формула (3.39) представляет собой явное соотношение между энергией и импульсом. Учитывая определение (3.38) функций f , легко убедиться в том, что соответствующие функции Ψ обладают свойством истинных собственных состояний, т. е. являются

собственными функциями оператора импульса. Так как этот оператор, безусловно, эрмитов, любые две волновые функции, принадлежащие любому из рассмотренных выше семейств, взаимно ортогональны в случае, если они соответствуют различным значениям импульса. Между прочим, оказывается, что спектр (3.39) лежит выше точной кривой.

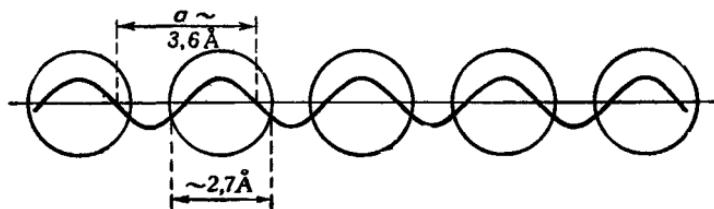


Фиг. 92. Экспериментальная кривая для структурного фактора жидкого гелия (а) и фейнмановский спектр возбуждений (б).
Пунктирной линией для сравнения изображен спектр Ландау.

Определяемая соотношением (3.40) функция $S(k)$ является структурным фактором жидкости, который можно найти экспериментально, по крайней мере для не слишком малых k . На фиг. 92, а изображен вид функции $S(k)$ в соответствии с измерениями Бьемона и Рики [21]. Наблюдаемое поведение теплопроводности ($\sim T^3$) при низких температурах позволяет надеяться, что экспериментально недоступимую часть кривой при малых k можно линейно экстраполировать через начало координат. Таким образом, мы получим энергетический спектр фононов в соответствии с рассмотрением Фейнмана. На фиг. 92, б изображена зависимость $\epsilon(k)$, полученная с помощью соотношения (3.39). Следует отметить, что в силу соотношения (3.38) наша волновая функция опять имеет вид (3.27), хотя здесь значения k лежат в роторной области.

Теория правильно описывает общие черты экспериментальной кривой, включая структуру при больших k , обнаруженную Хеншоу и Вудсом [95], однако минимальная ротонная энергия завышена примерно в 2 раза. Тем не менее рассматриваемый подход, очевидно, правильно передает наиболее существенные физические свойства, и необходимо лишь уточнить его (см. замечания в конце п. 6, д).

Мы видим, что ротонный минимум на кривой $E(k)$ обусловлен пиком функции $S(k)$. Появление этого пика, расположенного в окрестности точки $k = 2\pi/a$, в свою очередь связано с ближним порядком в жидкости, в частности с тенденцией



Фиг. 93.

ближлежащих атомов располагаться друг от друга на расстоянии порядка межатомного расстояния a . Это хорошо согласуется с нашими рассуждениями, проведенными в связи с фиг. 88. При дальнейшем возрастании k выделение фононных состояний таким способом, как это делалось раньше, становится все более затруднительным вследствие чисто геометрических соотношений между длиной волны и радиусом атома. В конце концов простое понятие фонона становится неприменимым. Однако для возбуждений с импульсами, лежащими в окрестности точки $k = 2\pi/a$, система обладает своего рода резонансными свойствами (фиг. 93), чем и объясняется относительная малость энергии возбуждения в этой области¹⁾. Проведенный краткий разбор ясно показывает, что рассматриваемые возбуждения не связаны с флуктуациями плотности.

Провал на кривой $E(k)$ при более высоких значениях k соответствует корреляции атомов, расположенных через один (во второй координационной сфере). В жидком гелии эта корреляция меньше, чем в других жидкостях, из-за большего удельного объема и большой энергии нулевых колебаний. Как уже отмечалось, только при больших значениях k выражение (3.39) переходит в спектр одночастичных возбуждений.

¹⁾ В кристалле возбуждения такого рода соответствуют фононы с волновым числом, равным вектору обратной решетки, энергия которых, очевидно, равна нулю. — Прим. ред.

д) Другой вывод фейнмановского спектра возбуждений. Спектр возбуждений Фейнмана, полученный ранее путем построения явного выражения для волновой функции, можно вывести путем обобщения структурного фактора $S(k, \omega)$, приведенного в § 2, п. 5, в. Переходя в полученном в § 2 соотношении (2.91) к пределу $T \rightarrow 0$, находим

$$S(k, \omega) = S(k) \delta(\hbar\omega - ck). \quad (3.41)$$

Это соотношение справедливо только для элементарных возбуждений типа фононов с линейным спектром. Предположим, что для произвольного спектра $\epsilon(k)$ можно записать

$$S(k, \omega) = S(k) \delta(\hbar\omega - \epsilon(k)). \quad (3.42)$$

Вспомним теперь теорему моментов (2.79) для классических жидкостей. Ее аналогом при $T = 0$ является соотношение (см. также гл. 5)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega S(k, \omega) d\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \quad (3.43)$$

Подставляя (3.42) в (3.43), сразу находим

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2MS(k)}. \quad (3.44)$$

Таким образом, мы пришли к фейнмановскому результату, полученному ранее с помощью пробной волновой функции $\rho_k \Phi$.

Такой спектр возбуждений согласуется с экспериментальными результатами в фононной области, но приводит, как мы уже видели, к количественным расхождениям в ротонной части. По-видимому, при малых длинах волн функцию Ван Хова следует обобщить с учетом взаимодействия различных возбуждений.

Фейнман и Коэн предложили некоторую модификацию фейнмановской волновой функции, учтя противоток, возникающий вблизи частицы, движущейся в жидкости. Такая модифицированная волновая функция дает лучшее согласие с экспериментом.

е) Асимптотическая форма радиальной функции распределения. Исходя из выражения для фейнмановского структурного фактора при малых k

$$S(k) \sim \frac{\hbar k}{2Mc}, \quad (3.45)$$

где c — скорость звука, нетрудно получить еще один результат для радиальной функции распределения $g(r)$. Ясно, что поведение $S(k)$ при малых k позволяет судить о поведении при

больших r функции $g(r)$, которую с помощью преобразования (2.47) можно представить в виде

$$g(r) = 1 + \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int_0^\infty \{S(k) - 1\} \frac{\sin kr}{kr} 4\pi k^2 dk, \quad (3.46)$$

где использовано также свойство сферической симметрии, имеющее место в жидкости.

В теории фурье-преобразований (см., например, [130]) доказывается, что для функции $F(x)$, достаточно гладкой вместе со своими производными, справедливо соотношение

$$\int_0^\infty F(x) \sin xr dx = \frac{F(0)}{r} - \frac{F''(0)}{r^3} + \frac{F^{IV}(0)}{r^5} + \dots \quad (3.47)$$

Из (3.45) – (3.47) непосредственно следует [59], что

$$g(r) = 1 - \frac{\hbar}{2\pi^2 \rho M c} r^{-4} + \dots \quad (3.48)$$

При выводе этого соотношения использован только результат Фейнмана (3.45) и допущение о том, что в случае бозе-жидкости функция $S(k)$ и ее производные не имеют особенностей. Такое предположение представляется вполне правдоподобным для бозе-жидкостей, но не для ферми-жидкостей [см. выражение для $S(k)$ для невзаимодействующих фермионов; в этом случае $S''(k)$ обладает разрывом при $k = 2k_f$, что существенно меняет асимптотическую форму $g(r)$, которая определяется формулой (1.5.13)].

Интересно отметить, что в результате выполненных Хуангом [97] (см. также [103]) явных вычислений функции $g(r)$ для бозе-газа из твердых шариков также была получена зависимость $\sim r^{-4}$ при больших r .

В заключение следует рассмотреть вопрос о влиянии притягивающего ван-дер-ваальсовского „хвоста“ парного потенциала взаимодействия $V(r)$ между атомами Не на свойства жидкого Не⁴. По-видимому, можно считать очевидным, что вид потенциала $V(r)$ количественно определяет функцию $S(k)$ и, кроме того, может нести ответственность за форму спектра возбуждений вблизи ротонного минимума. Здесь можно сослаться на работы Эндерби, Гаскелла и Марча [59]. Названные авторы пришли к выводу, что для классических диэлектрических жидкостей типа жидкого аргона с ван-дер-ваальсовским взаимодействием в выражение для $S(k)$ при малых k входит пропорциональный k^3 член, величина которого линейно зависит от ван-дер-ваальсовых сил. С другой стороны [124, 103], для

бозе-газа из твердых шариков диаметром a структурный фактор имеет вид

$$S(k) = k(k^2 + 16\pi a\rho)^{-1/2}, \quad (3.49)$$

что при малых k также дает член с k^3 . Более того, для фермионов уже учет статистики приводит к члену $\sim k^3$. Это дает основания полагать, что член с k^3 , который является поправкой к результату Фейнмана (3.45) при больших k , может зависеть как от статистики, так и от конкретных особенностей кривой потенциала межатомного взаимодействия. В настоящее время остается неясным, должен ли в выражении (3.45) при $T = 0$ появляться член k^2 после члена, линейного по k . Наличие таких четных членов не влияет на рассуждения относительно асимптотической формы функции $g(r)$, ибо они приводят к экспоненциально убывающим членам, как и в теории Орнштейна — Цернике (см., например, книгу Розенфельда [176]).

ж) *Волновые функции для движущейся жидкости и квантованные вихревые нити.* В рассмотренной выше теории Фейнмана подробно исследуются возбужденные состояния покоящейся жидкости.

Перейдем теперь к изучению вида волновой функции для движущейся жидкости. Как и раньше, будем исходить из точной волновой функции основного состояния Φ , с помощью которой построим функцию

$$\Psi = \left[\exp \left\{ i \sum_i s(\mathbf{r}_i) \right\} \right] \Phi. \quad (3.50)$$

На данном этапе мы делаем единственное предположение о том, что функция $s(\mathbf{r})$ медленно меняется при изменении координаты.

Можно показать, что (3.50) соответствует движущейся жидкости со средней плотностью импульса $\rho \mathbf{v}$, где

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{M} \operatorname{grad} s. \quad (3.51)$$

Кроме того, если мы конкретизируем требование о медленном изменении s , приняв, что на расстоянии порядка среднего межатомного расстояния $\operatorname{grad} s$ должен меняться лишь на некоторую свою долю, то такая волновая функция с достаточной степенью точности будет решением волнового уравнения. Более того, построенные описанным образом волновые функции ортогональны основному состоянию и друг другу.

До сих пор мы не наложили условия, состоящего в том, что функция Ψ должна описывать систему бозонов. Поскольку функция Φ обладает необходимыми свойствами, достаточно потребовать, чтобы модуль фазового множителя был инвариант-

тей относительно перестановки атомов. Это означает, что если выбрать в жидкости контур из N атомов и рассмотреть смещение $\delta\mathbf{r}$, в результате которого один атом переходит в положение соседнего атома, то взятая по контуру сумма

$$\sum \text{grad } s(\mathbf{r}_i) \cdot \delta\mathbf{r}$$

должна быть равна целому числу, умноженному на 2π . Но, как мы уже видели, s является потенциалом скорости, откуда следует, что

$$\oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{r} = \frac{n\hbar}{M}, \quad (3.52)$$

где n — целое число.

Таким образом, из (3.51) ясно, что волновая функция (3.50) описывает безвихревой поток, т. е.

$$\text{rot } \mathbf{v} = 0,$$

а циркуляция потока по замкнутому контуру квантована в единицах \hbar/M .

Нигде в этих рассуждениях не было показано, что предполагаемая форма волновой функции Ψ является единственной возможной для описания движущейся жидкости. Фактически принято считать, что это единственный способ, позволяющий одновременно описывать безвихревой поток и обеспечивать точную бозе-симметрию, хотя, насколько нам известно, строгого доказательства не существует. Для оценки такого подхода следует отметить, что мы ничего или почти ничего не знаем о том случае, когда потенциал скорости s меняется быстро.

Таким образом, мы приходим к выводу о существовании нового типа возмущений — квантованных вихревых нитей (см. стр. 329). Их существование представляет не только чисто академический интерес, так как они были обнаружены экспериментально, в частности, Вайненом [201]. Идея его эксперимента состоит в следующем: если вокруг тонкой колеблющейся проволочки существуют квантованные вихревые нити, то на проволочку будет действовать сила, перпендикулярная направлению движения, что приведет к повороту плоскости колебаний. Скорость поворота плоскости колебаний пропорциональна циркуляции вихря, что позволяет экспериментально проверить формулу (3.52). Не вдаваясь в подробности, укажем только, что эксперимент Вайнена фактически подтвердил квантование циркуляции. Однако едва ли можно утверждать, что в этом эксперименте было окончательно доказано существование свободных вихревых нитей.

Читатель, вероятно, заметил интересное сходство между рассмотрением квантования потока в сверхпроводниках, проведенным в гл. 7, и квантованием циркуляции вихря.

7. Модель Боголюбова

Как мы видели, в теории Фейнмана было очень трудно провести последовательное математическое рассмотрение. Преимущество излагаемого ниже подхода состоит в том, что он позволяет получить весьма строгое решение; правда, это достигается за счет того, что приходится рассматривать значительно более простую систему. Подробное изучение модели Боголюбова полезно еще и тем, что она имеет достаточно много общих черт с теорией Фейнмана.

Метод вторичного квантования очень широко используется в многобозонных задачах. Однако при его применении к HeII возникает трудность, связанная с тем, что потенциал межатомного взаимодействия имеет твердую сердцевину; матричные элементы такого потенциала расходятся. В связи с этим необходимо видоизменить исходную задачу. Предположим, что мы имеем дело с набором взаимодействующих частиц, матричные элементы потенциала взаимодействия которых сходятся, причем само взаимодействие можно считать малым возмущением. Конкретно это означает, что мы изучаем систему с гамильтонианом

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \rangle a_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'_2} a_{\mathbf{k}'_1}, \quad (3.53)$$

где a — бозе-операторы.

Здесь уместно повторить сделанные в конце п. 2 замечания о числе заполнения состояния с нулевым импульсом. При последующих вычислениях взаимодействие будет предполагаться настолько слабым, что не только число заполнения конденсата остается макроскопическим, но и число возбужденных частиц достаточно мало, чтобы в первом приближении можно было заменить отношение N_0/N единицей (N_0 — среднее число заполнения состояния с нулевым импульсом). Чтобы подчеркнуть особую роль конденсата, представим (3.53) в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} V_0 a_0^{\dagger 2} a_0^2 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (V_0 + V_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} a_0^{\dagger} a_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} a_0^2 + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} a_0^{\dagger 2}) + V_R, \quad (3.54)$$

где через V_R обозначены те члены потенциальной энергии, в которые входит не более одного оператора с нулевым импульсом. Предположим теперь, что потенциалом V_R можно пренебречь по сравнению с другими членами в правой части (3.54). Оригинальные рассуждения Боголюбова заключались в том, что по порядку величины (смысл этого станет ясен позже) члены, входящие в V_R , меньше (несмотря на то что число их больше) оставшихся членов и могут быть опущены. Физически это кажется вполне разумным, так как если „почти все“ частицы находятся в конденсате, то взаимное рассеяние очень малого числа возбужденных частиц будет играть второстепенную роль. Иначе говоря, мы предполагаем, что решающее значение имеет конденсация Бозе – Энштейна, и оставляем только такие члены, которые явно учитывают конденсат. Будем считать, что в нашей упрощенной системе возможно только возбуждение пар \mathbf{k} , $-\mathbf{k}$ из конденсата и возвращение этих пар в конденсат. Взаимодействие между различными парами принимается равным нулю. Здесь очень отчетливо выявляется аналогия между таким модельным гамильтонианом и теорией БКШ, развитой в гл. 7.

а) Предельный случай слабого взаимодействия. С помощью нашего предположения о слабости взаимодействия произведем дальнейшее упрощение гамильтонiana. Имеем

$$N_{op} = a_0^\dagger a_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k}, \quad (3.55)$$

откуда следует

$$N_{op}^2 = (a_0^\dagger a_0)^2 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k} a_0^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_0 a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k}) + \dots \quad (3.56)$$

Замечая, что

$$(a_0^\dagger a_0)^2 = a_0^{\dagger 2} a_0^2 + a_0^\dagger a_0, \quad (3.57)$$

получаем с помощью (3.56) и (3.54)

$$\begin{aligned} H = \frac{1}{2} V_0 (N_{op}^2 - a_0^\dagger a_0) + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \epsilon_\mathbf{k} a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_\mathbf{k} a_\mathbf{k}^\dagger a_\mathbf{k} a_0^\dagger a_0 + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} V_\mathbf{k} (a_\mathbf{k}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_0^2 + a_\mathbf{k}^\dagger a_{-\mathbf{k}} a_0^{\dagger 2}). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Высшие члены (3.56) относятся к членам такого типа, которыми мы решили пренебречь в гамильтониане H , поэтому всюду далее мы не будем их выписывать. Обращаясь к первому члену правой части равенства (3.58), мы видим, что для N -частичных волновых функций N_{op}^2 можно заменить на N^2 и пренебречь членом $a_0^\dagger a_0$ — числом частиц в конденсате (которое не превышает N и пренебрежимо мало по сравнению с N^2).

Будем пользоваться новым набором операторов

$$A_k = \frac{1}{\sqrt{N}} a_k a_0^\dagger, \quad A_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} a_k^\dagger a_0, \quad (k \neq 0), \quad (3.59)$$

описывающих возбуждение частиц из конденсата. В связи с этим отметим, что по отношению к N -частичным волновым функциям

$$\begin{aligned} a_k^\dagger a_k = \frac{a_k^\dagger a_k}{N} N_{op} &= \frac{a_k^\dagger a_k}{N} \left\{ a_0^\dagger a_0 + \sum_{l \neq 0} a_l^\dagger a_l \right\} = \\ &= \frac{a_k^\dagger a_0 a_k a_0^\dagger}{N} - \frac{a_k^\dagger a_k}{N} + \frac{1}{N} a_k^\dagger a_k \sum_{l \neq 0} a_l^\dagger a_l. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Последний член относится к числу членов, которыми мы пренебрегаем в используемом приближении, а второй пренебрежимо мал по сравнению с первым в силу макроскопического заполнения конденсата. Таким образом, мы можем заменить $a_k^\dagger a_k$ одним лишь первым членом в правой части (3.60), который точно равен произведению $A_k^\dagger A_k$. Подобным же образом третий член в правой части (3.58) можно переписать, используя равенство

$$a_k^\dagger a_k a_0^\dagger a_0 = a_k^\dagger a_0 a_k a_0^\dagger - a_k^\dagger a_k,$$

в правой части которого последний член значительно меньше первого. Аналогично преобразуется последний член в правой части (3.58). В результате соотношение (3.58) принимает вид

$$\begin{aligned} H = \frac{1}{2} N^2 V_0 + \sum_{k \neq 0} (\epsilon_k + NV_k) A_k^\dagger A_k + \\ + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} NV_k (A_k^\dagger A_{-k}^\dagger + A_k A_{-k}). \end{aligned} \quad (3.61)$$

В рамках используемого приближения A и A^\dagger являются бозе-операторами. Чтобы убедиться в этом, приведем соотношения

$$A_k A_l - A_l A_k = 0 = A_k^\dagger A_l^\dagger - A_l^\dagger A_k^\dagger \quad (l, k \neq 0), \quad (3.62)$$

которые являются следствием аналогичных соотношений для a и a^\dagger . Кроме того,

$$\begin{aligned} A_k A_l^\dagger - A_l^\dagger A_k = \frac{1}{N} (a_k^\dagger a_0 \delta_{kl} - a_l^\dagger a_k) = \\ = \frac{N_{op}}{N} \delta_{kl} - \frac{1}{N} \sum_{m \neq 0} a_m^\dagger a_m \delta_{kl} - \frac{1}{N} a_l^\dagger a_k \quad (l, k \neq 0). \end{aligned} \quad (3.63)$$

Как и раньше, правую часть соотношения (3.63) для соответствующих волновых функций можно заменить на $\delta_{\mathbf{k}}$, откуда следует, что A являются бозе-операторами.

Таким образом, нам остается исследовать гамильтониан (3.61) для бозе-операторов A . Напомним, что подобная задача для фермионов была решена в гл. 7, § 5, п. 1. Поэтому дальнейшее исследование будет очень похоже на проведенное выше; модификация необходима только для учета другой статистики. Воспользуемся преобразованием Боголюбова

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, & a_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}}^{\dagger}, \\ A_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}, & a_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= u_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

где $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ действительны, симметричны по \mathbf{k} и удовлетворяют соотношению

$$u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (3.65)$$

Определенные таким образом операторы a , как нетрудно проверить, также являются бозе-операторами. Заменяя операторы A в (3.61) на a , получаем

$$H = E + H_{11} + H_{20}, \quad (3.66)$$

где

$$E = \frac{1}{2} N^2 V_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [(\epsilon_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}}) v_{\mathbf{k}}^2 + NV_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}], \quad (3.67)$$

$$H_{11} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} [(\epsilon_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}})(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) + 2NV_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}] a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \quad (3.68)$$

$$H_{20} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left[(\epsilon_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}}) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} NV_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) \right] (a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}). \quad (3.69)$$

Для диагонализации гамильтониана необходимо, чтобы член H_{20} был равен нулю, т. е. для любых \mathbf{k} должно выполняться соотношение

$$2(\epsilon_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}}) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) = 0. \quad (3.70)$$

Записывая

$$u_{\mathbf{k}} = \operatorname{ch} \theta_{\mathbf{k}}, \quad v_{\mathbf{k}} = \operatorname{sh} \theta_{\mathbf{k}}, \quad (3.71)$$

где $\theta_{\mathbf{k}}$ действительны и симметричны, убеждаемся, что функции u и v удовлетворяют необходимым требованиям [см. (3.65) и выше]. Подставляя (3.71) в (3.70), получаем

$$\operatorname{th} 2\theta_{\mathbf{k}} = - \frac{NV_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}} + NV_{\mathbf{k}}}. \quad (3.72)$$

Теперь подставим в (3.68) величины

$$u_k^2 + v_k^2 = \operatorname{ch} 2\theta_k = \frac{\epsilon_k + NV_k}{V(\epsilon_k + NV_k)^2 - N^2 V_k^2}, \quad (3.73)$$

$$2u_k v_k = \operatorname{sh} 2\theta_k = -\frac{NV_k}{V(\epsilon_k + NV_k)^2 - N^2 V_k^2},$$

тогда

$$H_{11} = \sum_{k \neq 0} E_k a_k^\dagger a_k, \quad E_k = \sqrt{(\epsilon_k + NV_k)^2 - N^2 V_k^2}. \quad (3.74)$$

Наконец, с помощью соотношения

$$v_k^2 = \operatorname{sh}^2 \theta_k = \frac{1}{2} (\operatorname{ch} 2\theta_k - 1) = \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_k + NV_k}{E_k} - 1 \right) \quad (3.75)$$

можно упростить соотношение (3.67) и привести его к виду

$$E = \frac{1}{2} N^2 V_0 + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (E_k - \epsilon_k - NV_k). \quad (3.76)$$

Следует отметить, что если бы мы воспользовались вариационной волновой функцией Φ , удовлетворяющей условию

$$a_k \Phi = 0 \quad (\text{при любых } k), \quad (3.77)$$

и минимизировал матричный элемент

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = E, \quad (3.78)$$

то получили бы в качестве уравнения Эйлера наш результат (3.72), как и в методе БКШ. Таким образом, оба подхода совершенно эквивалентны.

Итак, задача в основном уже решена. Нам остается проанализировать полученные результаты и по мере возможностей установить связь с предыдущим изложением. На этом этапе полезно указать, что использованные выше величины V_k связаны с величинами $V(k)$, фигурирующими в § 2, п. 5, соотношением

$$V_k = \frac{1}{Q} V(k), \quad (3.79)$$

в котором функция $V(k)$ является фурье-образом $V(r)$ и, следовательно, по порядку величины равна единице.

б) *Основное состояние и скорость звука.* Одной из наиболее легко определяемых физических величин является скорость

звука c . Ее можно вычислить с помощью (3.76) и соотношений

$$c = \sqrt{\frac{1}{M} \frac{dP}{d\rho}}, \quad P = \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left(\frac{E}{N} \right), \quad (3.80)$$

где, как обычно, $\rho = N/\Omega$ — средняя плотность числа частиц, P — давление. Второй член в правой части (3.76), очевидно, имеет величину второго порядка малости по потенциалу и, следовательно, в предельном случае слабого взаимодействия пре-небрежимо мал по сравнению с первым. В таком случае получаем

$$c = \sqrt{\frac{\rho V(0)}{M}}, \quad (3.81)$$

что согласуется с классическим результатом (2.77) для достаточно низких температур. Следует отметить, что соотношение (3.81) не зависит от конкретных подробностей анализа, проведенного выше. Если, например, почти все частицы находятся в конденсате, то, учитывая только взаимодействия между ними, мы получим, что доминирующий член в выражении для энергии имеет вид $1/2N^2V_0$.

Рассмотрим теперь другой представляющий интерес вопрос, а именно пространственную структуру волновой функции основного состояния. Подробное его исследование содержится в книге Хуанга [98]. Здесь мы приведем лишь окончательный результат и покажем, что он удовлетворяет условию (3.77). Это очень напоминает метод БКШ (см. гл. 7, § 4, п. 2 и 4). Хуанг показал, что (ненормированная) волновая функция основного состояния имеет вид

$$\Phi = \sum' \left(\frac{v_{\mathbf{k}_1}}{u_{\mathbf{k}_1}} \right)^{n_{\mathbf{k}_1}} \left(\frac{v_{\mathbf{k}_2}}{u_{\mathbf{k}_2}} \right)^{n_{\mathbf{k}_2}} \dots \left| n_0 \ n_{\mathbf{k}_1} n_{\mathbf{k}_2} \dots \middle| n_{-\mathbf{k}_1} - n_{\mathbf{k}_2} \dots \right\rangle, \quad (3.82)$$

где \sum' соответствует суммированию по всем возможным N -частичным волновым функциям указанного типа, для которых $n_{\mathbf{k}} = n_{-\mathbf{k}}$ при любых \mathbf{k} . Волновые функции, входящие в (3.82), точно совпадают с рассмотренными в п. 1 волновыми функциями независимых бозе-частиц, однако здесь выбраны обозначения, подчеркивающие особую роль состояний с противоположными импульсами. Выражение (3.82) не должно, вообще говоря, вызывать удивления, так как оно является прямым бозе-аналогом N -частичной компоненты волновой функции в теории БКШ [см. (7.49) и далее]. Чтобы убедиться в правильности выражения (3.82), укажем, что с помощью (3.59) и свойств бозе-операторов рождения и уничтожения можно получить

следующие соотношения для функции Φ , определяемой соотношением (3.82):

$$u_k A_k \Phi = \sum' \left(\frac{v_{k_1}}{u_{k_1}} \right)^{n_{k_1}} \left(\frac{v_{k_2}}{u_{k_2}} \right)^{n_{k_2}} \dots \frac{v_k^{n_k}}{u_k^{n_k-1}} \dots \times \\ \times \frac{\sqrt{n_0+1} \sqrt{n_k}}{\sqrt{N}} \left| n_0 + 1 \begin{smallmatrix} n_{k_1} & \dots & n_k - 1 & \dots \\ n_{-k_1} & \dots & n_{-k} \end{smallmatrix} \right\rangle \quad (3.83)$$

и

$$v_k A_{-k}^+ \Phi = \sum' \left(\frac{v_{k_1}}{u_{k_1}} \right)^{n_{k_1}} \left(\frac{v_{k_2}}{u_{k_2}} \right)^{n_{k_2}} \dots \frac{v_k^{n_k+1}}{u_k^{n_k}} \dots \times \\ \times \frac{\sqrt{n_0} \sqrt{n_k+1}}{\sqrt{N}} \left| n_0 - 1 \begin{smallmatrix} n_{k_1} & \dots & n_k \dots \\ n_{-k_1} & \dots & n_{-k} + 1 \dots \end{smallmatrix} \right\rangle. \quad (3.84)$$

В соответствии с нашим допущением о почти полном заполнении конденсата мы можем сократить $\sqrt{n_0+1}$ в (3.83) и $\sqrt{n_0}$ в (3.84) с множителем \sqrt{N} . Полученные выражения равны, в чем можно убедиться, заменяя в (3.83) n_k на $n_k + 1$, n_{-k} на $n_{-k} + 1$ и n_0 на $n_0 - 2$ (последнее для сохранения числа частиц). Но согласно определению a_k [см. (3.64)], эквивалентность выражений (3.83) и (3.84) означает, что $a_k \Phi = 0$.

Укажем, наконец, что изложенная здесь теория Боголюбова позволяет получить правильно первые члены разложения по V (перед которым стоит коэффициента взаимодействия), но не верна для разложения по плотности. Так, при разложении второй части (3.76) по степеням $\rho V(k)/\epsilon(k)$ основной член линеен по ρ и квадратичен по V . Таким образом, второй член и, разумеется, все остальные, отброшенные в предыдущем анализе при переходе от (3.53) и (3.61), дают поправку к первому члену разложения. Обзор теории точного разложения по степеням плотности см. в работе Либа [126].

в) Воздужденные состояния. Нам удалось свести систему к набору независимых бозе-квазичастиц (3.74). При этом возбужденные состояния определяются как $a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger \dots \Phi$ с соответствующей энергией возбуждения $E_{k_1} + E_{k_2} + \dots$. Простейшее возбуждение имеет вид $a_k^\dagger \Phi$ и обладает энергией E_k . Покажем теперь, что E_k представляет собой спектр возбуждений, рассмотренный в гл. 1, § 11. Для этого нужно только убедиться, что hk соответствует как импульсу квазичастиц, так и импульсу первоначальных отдельных частиц. Будем действовать так же, как и в гл. 7, § 5, п. 4, а. Необходимо доказать, что

$$\sum k a_k^\dagger a_k = \sum k a_k^\dagger a_k. \quad (3.85)$$

Чтобы сделать это, отметим прежде всего, что

$$\sum k A_k^\dagger A_k = \sum k [u_k^2 a_k^\dagger a_k + v_k^2 + v_k^2 a_{-k}^\dagger a_{-k} + u_k v_k (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_{-k} a_k)] = \\ = \sum k a_k^\dagger a_k, \quad (3.86)$$

где мы воспользовались симметрией и применили условие (3.65). Но ранее уже было показано [см. (3.60) и последующие замечания], что $A_k^\dagger A_k$ можно заменить на $a_k^\dagger a_k$, откуда и следует соотношение (3.85).

Доказав таким образом, что E_k является спектром элементарных возбуждений, перейдем к исследованию его формы. Последняя, очевидно, зависит от конкретного выбора V_k , тем не менее возможно указать и некоторые общие закономерности. При малых k с помощью (3.74) получаем спектр фононного типа

$$E_k \sim \sqrt{2\epsilon_k \rho V(0)} = \hbar k \sqrt{\frac{\rho V(0)}{M}}, \quad (3.87)$$

соответствующий скорости звука $dE/d(\hbar k) = \sqrt{\rho V(0)/M}$, что совпадает с (3.81). Как было показано ранее (см. п. 5), фононный спектр имеет существенное значение для обеспечения сверхтекучести. Следует указать, что соотношение (3.87) имеет смысл только при положительном потенциале $V(0)$. Это означает, что потенциал взаимодействия обязательно должен иметь отталкивательную часть в отличие от теории БКШ для фермионов, где для получения сверхтекучести необходимо ввести притяжение в потенциал эффективного межэлектронного взаимодействия.

В другом предельном случае больших k , когда $\epsilon_k \gg \rho V(k)$, из второго соотношения (3.74) получаем выражение

$$E_k = \epsilon_k + \rho V(k) + \dots, \quad (3.88)$$

в котором основным является одиночесточный член. Точный вид E_k при промежуточных значениях k зависит от конкретной формы V_k ; в частности, нетрудно построить семейство таких функций, которые приводят к кривым энергетического спектра типа Ландау с ротонными минимумами.

Наконец, покажем, что возбужденные состояния $a_k^\dagger \Phi$ в конфигурационном пространстве точно совпадают с функциями (3.27), использованными Фейнманом для описания фононных и ротонных состояний. Чтобы доказать это, рассмотрим два слагаемых, которые входят в $a_k^\dagger \Phi$ в соответствии с определением (3.64).

Прежде всего, согласно (3.82), имеем

$$\begin{aligned} v_k A_{-k} \Phi &= \frac{v_k a_k^+ a_0^+}{\sqrt{N}} \sum' \dots \left(\frac{v_k}{u_k} \right)^{n_k} \dots \left| n_0 \begin{smallmatrix} n_{k_1} & \dots & n_k & \dots \\ n_{-k_1} & \dots & n_{-k} & \dots \end{smallmatrix} \right\rangle = \\ &= v_k \sum' \dots \left(\frac{v_k}{u_k} \right)^{n_k} \dots \frac{\sqrt{n_0 + 1}}{\sqrt{N}} \frac{\sqrt{n_k}}{\sqrt{N}} \left| n_0 + 1 \begin{smallmatrix} n_{k_1} & \dots & n_k & \dots \\ n_{-k_1} & \dots & n_{-k} - 1 & \dots \end{smallmatrix} \right\rangle = \\ &= v_k \frac{a_k^+ a_0^+}{\sqrt{N}} \sum' \dots \left(\frac{v_k}{u_k} \right)^{n_k} \dots \left| n_0 + 2 \begin{smallmatrix} n_{k_1} & \dots & n_k - 1 & \dots \\ n_{-k_1} & \dots & n_{-k} - 1 & \dots \end{smallmatrix} \right\rangle. \quad (3.89) \end{aligned}$$

Теперь переопределим суммирование, заменяя $n_k - 1$ на n_k , $n_{-k} - 1$ на n_{-k} и n_0 на $n_0 - 2$ для сохранения полного числа частиц. В результате соотношение (3.85) принимает вид

$$\frac{v_k a_k^+ a_0^+}{\sqrt{N}} \sum' \dots \left(\frac{v_k}{u_k} \right)^{n_k + 1} \dots \left| n_0 \begin{smallmatrix} n_{k_1} & \dots & n_k & \dots \\ n_{-k_1} & \dots & n_{-k} & \dots \end{smallmatrix} \right\rangle = \frac{v_k^2}{u_k} a_k^+ a_0^+ \Phi. \quad (3.90)$$

Таким образом, получаем

$$a_k^+ \Phi = u_k A_k^+ \Phi - v_k A_{-k} \Phi = \frac{1}{u_k} a_k^+ a_0^+ \Phi. \quad (3.91)$$

Если считать, что функция Φ разложена по одиночественным состояниям, как в (3.82), то можно воспользоваться соотношением (3.6), согласно которому действие оператора $a_k^+ a_0^+$ на любое из таких состояний соответствует умножению его на $\sum_i \exp(i k \cdot r_i)$.

Отсюда следует, что это справедливо также и для Φ , и мы получаем

$$a_k^+ \Phi = \sum_i e^{i k \cdot r_i} \Phi, \quad (3.92)$$

т. е. выражение для волновой функции возбужденного состояния в фейнмановском анализе, имеющем более интуитивный характер.

2) *Распределение по импульсам.* Распределение по импульсам представляет собой некоторый интерес. Оно имеет вид

$$\langle \Phi | a_k^+ a_k | \Phi \rangle = v_k^2 \quad (k \neq 0), \quad (3.93)$$

т. е. совпадает с (3.75). Не делая никаких конкретных предположений о виде функциональной зависимости V_k , нетрудно убедиться, что график этой функции должен соответствовать изображенному на фиг. 94. Среднее число заполнения состояния с нулевым импульсом получается простым вычитанием

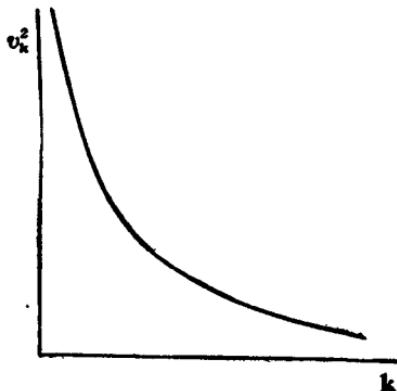
$$N_0 = N - \sum_{k \neq 0} v_k^2. \quad (3.94)$$

Последнюю сумму можно преобразовать в сходящийся интеграл, умноженный на Ω , в чем можно убедиться непосредственно путем разложения v_k^2 в областях возможной расходности. При этом имеем

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\rho V(k)}{2\epsilon(k)}} + \dots \text{ (при малых } k\text{),} \quad (3.95)$$

$$v_k^2 = \left(\frac{\rho V(k)}{2\epsilon(k)} \right)^2 + \dots \text{ (при больших } k\text{).} \quad (3.96)$$

Таким образом, мы получили критерий применимости метода Боголюбова, состоящий в следующем: параметры системы



Фиг. 94. Распределение по импульсам.

должны иметь такую величину, чтобы число частиц вне конденсата, равное второму члену правой части (3.94), было мало по сравнению с полным числом частиц N . Пример использования этого критерия будет дан в § 4 при рассмотрении заряженного бозе-газа.

§ 4. ЗАРЯЖЕННЫЙ БОЗЕ-ГАЗ

В заключение настоящей главы рассмотрим бозонный аналог электронного газа большой плотности (см. гл. 5), а именно заряженный бозе-газ, движущийся в однородном нейтрализующем фоне.

Интерес к этой задаче впервые возник после работ Шафрота [180, 181], который исследовал свойства такой системы, полагая, что она должна обнаруживать сверхпроводимость, подобную существующей в металлах [20].

Впоследствии исследование этой задачи было продолжено. Первая работа в этой области принадлежит Фолди [68],

подход которого был развит Жирардо [81]. Названные авторы нашли зависимость энергии корреляции от плотности в пределе высокой плотности; в этом смысле их результат представляет собой аналог ряда (5.3.22) для корреляционной энергии электронного газа высокой плотности (см. гл. 5). В вычислениях Гаскелла [76] используется метод коллективных координат, а в работе Стефена [192] рассматривается случай конечных температур. Ниже мы излагаем работу Фолди, которая может служить иллюстрацией использования развитого выше формализма Боголюбова.

1. Исследование Фолди

Мы можем почти без изменений применить результаты, полученные в § 3, п. 7. Необходимо помнить лишь о существовании нейтрализующего заряженного фона. Реально фон нужно будет учесть лишь один раз при рассмотрении полной энергии. Очевидно, что в соотношении (3.76) нужно опустить первый член, представляющий собственную энергию однородного распределения заряда. В остальном полученные выше соотношения остаются без изменения, за исключением того, что в данном случае $V_k = 4\pi e^2/(\Omega k^2)$ (поскольку в системе имеет место кулоновское взаимодействие) и $\epsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$.

Начнем с изучения условий, при которых метод Боголюбова применим к рассматриваемой задаче. Для этой цели [см. замечания после (3.96)] оценим число частиц вне конденсата, которое определяется вторым членом соотношения (3.94). Имеем

$$N - N_0 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^\infty v_k^2 4\pi k^2 dk; \quad (4.1)$$

исходя из этого соотношения, с помощью (3.74), (3.75) и конкретного вида V_k , получаем

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{r_s^{3/4}}{\pi^{3/4}} \int_0^\infty \left[\frac{\xi^4 + 2}{(\xi^4 + 4)^{1/2}} - \xi^2 \right] d\xi = 0,2114 r_s^{3/4}, \quad (4.2)$$

где r_s — обычный безразмерный параметр плотности, равный $(3\Omega/4\pi N)^{1/3} me^2/\hbar^2$. Как мы уже видели, метод Боголюбова применим в том случае, когда число частиц вне конденсата (4.2) мало. Полученные ниже результаты должны быть справедливы в пределе высокой плотности $r_s \rightarrow 0$.

а) Энергия основного состояния. Учитывая модификацию, необходимую для учета нейтрализующего заряда, для полной

энергии системы [ср. (3.76)] можно написать выражение

$$E = \frac{\Omega}{2(2\pi)^3} \int_0^{\infty} (E_k - \epsilon_k - NV_k) 4\pi k^2 dk. \quad (4.3)$$

Воспользуемся снова кулоновской формой V_k и определим энергию, приходящуюся на одну частицу:

$$\frac{E}{N} = r_s^{-3/4} \frac{3^{1/4}}{\pi} \int_0^{\infty} [\xi^2 (\xi^4 + 4)^{1/2} - \xi^4 - 2] d\xi = -0,803 r_s^{-3/4}. \quad (4.4)$$

Очевидно, что этот член является основным в разложении в случае высокой плотности. Так как вклад невзаимодействующих частиц равен нулю (кинетическая энергия равна нулю, а потенциальная обращается в нуль из-за наличия заряженного фона), соотношение (4.4) определяет полную корреляционную энергию и, следовательно, обязательно меньше нуля.

б) Энергии возбуждения. Из (3.72) имеем

$$E_k = \hbar \left(\omega_p^2 + \frac{\hbar^2 k^4}{4m^2} \right)^{1/2}, \quad \omega_p = \left(\frac{4\pi e^2}{m} \right)^{1/2}. \quad (4.5)$$

Таким образом, при малых k энергии возбуждений имеют такой же вид, как и для плазменных колебаний, с характерным дисперсионным соотношением. Наличие конечной энергетической щели и форма спектра возбуждений свидетельствуют о том, что заряженный бозе-газ при высоких плотностях является и сверхтекучим и сверхпроводящим. Кулоновское взаимодействие, безусловно, имеет решающее значение для образования энергетической щели, ибо, как мы видим из (3.87), если потенциал $V(k)$ конечен при $k \rightarrow 0$, то образуется фоновый спектр. Ситуация очень похожа на обсуждавшуюся при рассмотрении коллективных мод в подобных системах (см. фиг. 44 в гл. 5, где предел при $k=0$ не зависит от типа статистики частиц). В этом случае [ср. (2.74) и (2.75)] при конечном $V(0)$ получаем нулевой звук с частотой, пропорциональной волновому вектору. Если же $V(0)$ соответствует кулоновскому взаимодействию, то получаем плазменные колебания, для возбуждения которых нужна энергия $\hbar\omega_p$.

Интересно также, что, согласно (4.5), энергия одночастичных возбуждений изменяется непрерывно при возрастании k от значения, соответствующего плазменному спектру, до спектра свободных частиц.

Фактически такой подход приводит к серьезной трудности, которая не сразу выявляется [129]. Чтобы вычислить член следующего порядка в разложении энергии (4.4), необходимо

учитывать члены потенциальной энергии, опущенные в теории Боголюбова. При этом возникают расходящиеся интегралы, как в теории Гелл-Манна и Бракнера, рассмотренной в гл. 5. Причина возникновения и способ устранения таких расходимостей совершенно аналогичны рассмотренным раньше. В результате получается дополнительный вклад в (4.4) порядка $-1/8 \ln r_s$, как впервые было показано Жирардо [81].

В пределе низкой плотности можно воспользоваться соображениями, развитыми в гл. 5, § 8. Тогда и энергия основного состояния определяется соотношением (5.8.4) (см. также замечания непосредственно после него). Так как в этом случае низколежащие возбуждения относятся к фононному типу, ясно, что при уменьшении плотности энергетическая щель будет исчезать при некотором промежуточном значении плотности.

ЗАДАЧИ

8.1. Пусть для $\epsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2M$ энергетический спектр (3.74) определяет кривую Ландау типа изображенной на фиг. 86 с фононной (3.18) и ротонной (3.19) частями. Показать, что в фононной области

$$NV_{\mathbf{k}} \sim Mc^2 \quad (1)$$

и поправочный член следующего порядка отрицателен, тогда как в ротонной области

$$NV_{\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}_0}}{2} \left[\left(\frac{\Delta}{\epsilon_{\mathbf{k}_0}} \right)^2 - 1 \right] - (k - k_0) \frac{\epsilon'_{\mathbf{k}_0}}{2} \left[\left(\frac{\Delta}{\epsilon_{\mathbf{k}_0}} \right)^2 + 1 \right] + c_2 (k - k_0)^2 + \dots, \quad (2)$$

где

$$\lim_{\Delta/\epsilon_{\mathbf{k}_0} \rightarrow 1} c_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{\mu} \right). \quad (3)$$

При этом получаются две типичные $NV_{\mathbf{k}}$ кривые, одна для $\Delta > \epsilon_{\mathbf{k}_0}$, а другая для $\Delta < \epsilon_{\mathbf{k}_0}$, которые дают спектр Ландау.

Если $V(k) [= \Omega V_{\mathbf{k}}$, согласно (3.79)] считать просто фурье-образом некоторого сферически симметричного потенциала $V(r)$, то основная поправка к (1) будет квадратична по k и отрицательна. Пользуясь соотношением (3.47), доказать, что отсюда следует наличие у потенциала $V(r)$ характерного для гелия притягивающего „хвоста“, где $V \sim r^{-6}$.

8.2. Показать, что спектр Фейнмана (3.39) можно получить из волновой функции (3.30), потребовав, чтобы последняя была собственной функцией импульса.

8.3. Исследовать энергетический спектр (3.74) для (вообще говоря, нереального) случая взаимодействия, имеющего вид

$$V(k) = \begin{cases} V(0) & (> 0), \\ 0, & k \leq k_0, \\ & k > k_0. \end{cases} \quad (4)$$

Показать явно, что в общем случае появление ротонного минимума может быть обусловлено не только наличием отрицательной области $V(k)$, но и просто достаточно быстрым убыванием этой функции.

Перейти к пределу $k_0 \rightarrow \infty$; при этом получится δ -образный потенциал взаимодействия в пространстве координат. Исследовать для одномерного случая спектр возбуждений, полную энергию и заполнение основного состояния такой системы, используя (3.74), (3.76) и (3.94). Полученные результаты следует сопоставить с точными результатами Либа и Лиигера [127, 128].

8.4. Использовать для вычисления соотношений (2.52) и (2.56) модель Дебая (В этом приближении предполагается изотропность и одинаковая скорость $c = \omega_q^k / q$ распространения продольных и поперечных звуковых волн).

Это позволяет заменить $\sum_{q, k}$ на $\frac{1}{3} \int_0^{q_D} dq$, где $q_D = (6\pi^2 N/\Omega)^{1/3}$. Характеристическая температура Дебая Θ_D , используемая в этом приближении, определяется из соотношения $k_B \Theta_D = \hbar q_D c$.)

Полагая в (2.52) $n_q^k = 0$, доказать, что корреляция нулевых колебаний в приближении Дебая определяется соотношением

$$\langle \{K \cdot u_m(0)\} \{K \cdot u_n(t)\} \rangle_{T=0}^{(D)} = \frac{9\hbar^2 |m - n|}{M4k_B \Theta_D q_D^2} \left\{ \frac{1 - \exp[iq_D(|m - n| + ct)]}{|m - n| + ct} + \right. \\ \left. + \frac{1 - \exp[-iq_D(|m - n| - ct)]}{|m - n| - ct} \right\}.$$

Доказать также, что (2.56) принимает вид

$$2W^{(D)} = \frac{9K^2}{4Mk_B \Theta_D} \left\{ 1 + 4 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right) \Phi \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) \right\},$$

где

$$\Phi(x) = \frac{1}{x} \int_0^x \frac{y dy}{e^y - 1}$$

— характерная функция теории Дебая.

Глава 9

БОЛЬШАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ СУММА

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

До сих пор мы исследовали главным образом основное состояние и низколежащие возбужденные состояния произвольных систем многих тел. Для изучения более высоких возбужденных состояний, вырождение которых будет возрастать при увеличении объема исследуемой системы, используемые ранее методы недостаточно удобны. Таким образом, здесь возникает необходимость в более полном использовании общего формализма статистической механики. Поэтому мы сразу займемся вычислением большой статистической суммы Z_G .

Вычисление объемных свойств системы на основе Z_G производится обычным способом (см., например, учебник Ландау и Лифшица [120]). В § 7 мы проведем непосредственный вывод термодинамических свойств системы с кулоновским взаимодействием. Конечно, теория может иметь более широкое применение, но здесь мы ограничимся только названным примером. Другие примеры из теории для конечных температур будут приведены в гл. 10.

С помощью методов, аналогичных рассмотренным в гл. 4, будет доказана возможность диаграммного анализа большой статистической суммы Z_G . Другой возможный подход состоит в обобщении метода матриц Блоха, рассмотренного в гл. 1, § 6 и 7 (фактически уравнение Блоха используется в подходе, излагаемом в настоящей главе). Такой метод применялся, например, Монтроллом и Уордом [152].

§ 2. БОЛЬШАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ СУММА

Как обычно, гамильтониан H^* для N бессpinовых ферми-частиц определяется соотношениями (3.6.1) и (3.6.2). Однако для предстоящего анализа удобнее воспользоваться представлением через операторы a_k и a_k^\dagger , соответствующие базисному набору плоских волн [см. (3.6.3) и (3.6.4)]. Напомним читателю, что взаимодействие $v(r_1, r_2)$ по предположению зависит лишь от разности $|r_1 - r_2|$, а его матричные элементы между двухчастичными состояниями в виде плоских волн имеют вид (1.3.6).

Определим теперь большую (каноническую) статистическую сумму

$$Z_G = \text{Sp} [\exp \{-\beta(H - \mu N)\}] = \text{Sp} [\exp \{\alpha N - \beta H\}], \quad (2.1)$$

где символ Sp (шпур) означает взятие суммы диагональных матричных элементов соответствующего оператора, $N = \sum a_k^+ a_k$ — оператор числа частиц [см. (3.4.2)], μ — химический потенциал, β — обратная температура (точнее, $\beta = 1/k_B T$), $\alpha = \beta \mu$. Позднее в этой главе вместо α будет введено более удобное понятие фугативности $z = e^\alpha$.

Введем теперь статистический оператор

$$C = \exp \{-\beta(H - \mu N)\}. \quad (2.2)$$

Очевидно, что C является функцией β и удовлетворяет уравнению Блоха [см. (1.6.3)]

$$-\frac{\partial C}{\partial \beta} = (H - \mu N) C \quad (2.3)$$

с граничным условием

$$[C]_{\beta=0} = 1. \quad (2.4)$$

Как уже отмечалось в гл. 1, уравнение (2.3), формальным решением которого с граничным условием (2.4) является (2.2), очень похоже на уравнение Шредингера, в котором *it* заменено на β . Используя эту аналогию, мы так же, как и в гл. 4, получим разложение C по теории возмущений. Для сохранения аналогии мы будем часто называть величину β „временем“, используя кавычки, чтобы отличать ее от обычного времени.

1. Ряд теории возмущений для статистического оператора

Запишем модифицированный гамильтониан $H - \mu N$ в виде

$$H - \mu N = H_0 - \mu N + V = H'_0 + V, \quad (2.5)$$

где V — как обычно, общее возмущение.

По аналогии с гл. 4 введем зависящие от „времени“ операторы в представлении взаимодействия

$$\hat{V}(u) = \exp \{u H'_0\} V \exp \{-H'_0 u\}, \quad (2.6)$$

при этом роль „времени“ играет, очевидно, переменная u .

Выражая $V(u)$ через $a_{\mathbf{k}}$, имеем

$$V(u) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | v | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle a_{\mathbf{k}_1}^+(u) a_{\mathbf{k}_2}^+(u) a_{\mathbf{k}_3}(u) a_{\mathbf{k}_4}(u), \quad (2.7)$$

где

$$a_{\mathbf{k}}(u) = a_{\mathbf{k}} \exp \{-(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) u\} \quad (2.8)$$

и

$$a_{\mathbf{k}}^+(u) = a_{\mathbf{k}}^+ \exp \{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) u\}. \quad (2.9)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} (\exp \{\beta H'_0\} C) &= \exp \{\beta H'_0\} \frac{\partial C}{\partial \beta} + \\ &+ \exp \{\beta H'_0\} H'_0 C = -\exp \{\beta H'_0\} V C = -V(\beta) (\exp \{\beta H'_0\} C). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Из (2.10) получаем

$$\exp \{\beta H'_0\} C = 1 - \int_0^\beta V(u_1) du_1 + \int_0^\beta du_2 \int_0^{u_2} du_1 V(u_2) V(u_1) + \dots, \quad (2.11)$$

откуда

$$C = \sum_0^\infty (-1)^r \int_{\beta > u_1 > u_2 > \dots > u_r > 0} du_1 \dots du_r \exp \{-\beta H'_0\} V(u_1) \dots V(u_r). \quad (2.12)$$

Беря шпур этого разложения C , приходим к формальному разложению большой статистической суммы

$$Z_G = \sum_0^\infty (-1)^r \int_{\beta > u_1 > \dots > u_r > 0} du_r \dots du_1 \text{Sp} [\exp \{aN - \beta H_0\} V(u_1) \dots V(u_r)]. \quad (2.13)$$

2. Выражение большой статистической суммы через средние величины

Обозначим через Z_G^0 большую статистическую сумму системы без взаимодействия, т. е.

$$Z_G^0 = \text{Sp} [\exp \{-\beta (H_0 - \mu N)\}]. \quad (2.14)$$

Определим теперь среднее значение оператора θ для термодинамически равновесной системы невзаимодействующих частиц при температуре β следующим образом:

$$\langle\langle \theta \rangle\rangle_0 = \frac{\text{Sp} [\exp \{-\beta (H_0 - \mu N)\} \theta]}{Z_G^0}. \quad (2.15)$$

Используя это определение, перепишем (2.13):

$$\frac{Z_G}{Z_G^0} = \sum_0^{\infty} (-1)^r \int_{\beta > u_1 > \dots > u_r > 0} du_1 \dots du_r \langle\langle V(u_1) \dots V(u_r) \rangle\rangle_0. \quad (2.16)$$

§ 3. ДИАГРАММНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

В гл. 4 мы получили диаграммное представление для ряда теории возмущений для энергии основного состояния, записывая упорядоченное во времени произведение операторов через нормальные произведения и свертки. В основном состоянии невозмущенной системы средние значения нормальных произведений равны нулю. Если мы хотим и дальше использовать аналогию между температурной и временной теориями, то нам нужно так обобщить понятие нормального произведения, чтобы его среднее значение $\langle\langle \dots \rangle\rangle_0$, являющееся температурным аналогом среднего по основному состоянию, также было равно нулю.

1. Нормальные произведения

Мы видели в гл. 3 [см. (3.4.1)], что $N_k = a_k^\dagger a_k$ является оператором числа частиц в состоянии $|k\rangle$. Его среднее значение имеет вид

$$\begin{aligned} \langle\langle N_k \rangle\rangle_0 &= \frac{\text{Sp} [\exp \{-\beta(H_0 - \mu N)\} a_k^\dagger a_k]}{Z_G^0} = \\ &= \frac{\text{Sp} [\prod \exp \{(\alpha - \beta \epsilon_k) a_{k'}^\dagger a_{k'}\} a_k^\dagger a_k]}{Z_G^0} = \frac{\exp \{\alpha - \beta \epsilon_k\}}{1 + \exp \{\alpha - \beta \epsilon_k\}} = \\ &= \frac{1}{1 + \exp \{\beta (\epsilon_k - \mu)\}} = f_k, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где f_k — функция распределения Ферми — Дирака, определяющая вероятность заполнения состояния $|k\rangle$.

Теперь определим нормальное произведение следующим образом:

$$N(a_k^\dagger a_k) = (1 - f_k) a_k^\dagger a_k - f_k a_k a_k^\dagger. \quad (3.2)$$

Докажем, что это определение при нулевой температуре переходит в определение, данное в гл. 4. Действительно, при $\beta \rightarrow \infty$ функция $f_k \rightarrow 1$ для таких k , для которых $\epsilon_k < \mu$, и $f_k \rightarrow 0$ для таких k , для которых $\epsilon_k > \mu$. Тогда в первом случае $N(a_k^\dagger a_k)$ переходит в $a_k^\dagger a_k$, а во втором — в $-a_k a_k^\dagger$, что и требовалось доказать.

При конечной температуре состояние $|k\rangle$ с вероятностью f_k является заполненным и с вероятностью $1 - f_k$ — незаполненным. Воспользовавшись определением нормального произведения (3.2), получаем, что его среднее значение равно

$$\langle\langle N(a_k^+ a_k) \rangle\rangle_0 = \frac{\text{Sp} \left[\exp \left\{ - \sum \beta (\epsilon_{k'} - \mu) a_{k'}^+ a_{k'} \right\} \{(1 - f_k) a_k^+ a_k - f_k a_k a_k^+\} \right]}{Z_G^0} = \\ = \frac{\exp \{-\beta(\epsilon_k - \mu)\}(1 - f_k)}{1 + \exp \{-\beta(\epsilon_k - \mu)\}} - f_k(1 - f_k) = 0;$$

последнее равенство легко получается из (3.1).

2. Хронологическое спаривание

В соответствии с анализом, проведенным в гл. 4, хронологическое спаривание (свертка) двух зависящих от „времени“ операторов определяется как разность между их упорядоченным по „времени“ и нормальным произведениями.

Не равны нулю следующие свертки зависящих от „времени“ операторов рождения и уничтожения:

$$\overline{a_k^\dagger(u_2)} a_{k'}(u_1) = T[a_k^\dagger(u_2) a_{k'}(u_1)] - N[a_k^\dagger(u_2) a_{k'}(u_1)] = \\ = \begin{cases} f_k \delta_{kk'} \exp \{(\epsilon_k - \mu)(u_2 - u_1)\}, & (u_2 \geq u_1), \\ -(1 - f_k) \delta_{kk'} \exp \{(\epsilon_k - \mu)(u_2 - u_1)\}, & (u_2 < u_1). \end{cases} \quad (3.3)$$

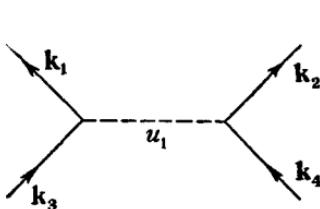
3. Графическое представление

Теперь к произведениям операторов, входящим в разложение (2.16) для Z_G/Z_G^0 , можно применить теорему Вика. Каждое произведение при этом выражается через свертки и нормальные произведения.

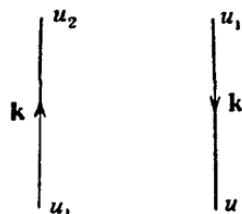
Типичный отличный от нуля член n -го порядка разложения (2.16) содержит:

- 1) Множитель $(-1)^n$.
- 2) Интегрирование по $u_1 \dots u_n$ в пределах $\beta > u_1 > u_2 > \dots > u_n > 0$.
- 3) n взаимодействий в моменты „времени“ $u_n \dots u_1$; матричные элементы каждого взаимодействия равны нулю, если не выполняется условие сохранения импульса.
- 4) Отличные от нуля свертки между $4n$ операторами рождения и уничтожения, связанные с n актами взаимодействия.

Как и в гл. 4, каждый такой член можно представить с помощью диаграммы, если матричному элементу $\langle k_1 k_2 | v | k_3 k_4 \rangle$ взаимодействия в момент u_1 поставить в соответствие диаграмму на фиг. 95, свертке $a_k(u_2) a_k^\dagger(u_1)$ — диаграмму на фиг. 96 при $u_2 \geq u_1$ или диаграмму на фиг. 97 при $u_2 < u_1$.



Фиг. 95.



Фиг. 96.

Фиг. 97.

Тогда типичная диаграмма, соответствующая члену n -го порядка, будет состоять из

1) n „вершин“ (горизонтальных пунктирных линий), соответствующих n актам взаимодействия в моменты $u_n \dots u_1$ и расположенных таким образом, что вершина с индексом u_i лежит выше вершины с индексом u_j , если $i < j$;

2) направленных сплошных линий, каждая из которых помечена значением импульса и проведена таким образом, что а) каждая сплошная линия соединяет две вершины или вершину саму с собой и б) в каждую вершину входят две линии и две линии выходят из нее.

Линия со стрелкой, направленной вверх, называется линией частицы, а со стрелкой, направленной вниз, — линией дырки. Будет показано, что направленные линии образуют систему замкнутых петель.

4. Правила вычисления вкладов диаграмм

Выше мы установили правила построения диаграмм, соответствующих членам разложения (2.16) для Z_A/Z_A^0 . Дадим теперь правила вычисления вклада в разложение Z_A/Z_A^0 произвольной данной диаграммы с индексами для направленных линий и линий взаимодействия:

1) Поставьте матричный элемент $\frac{1}{2} \langle kk' | v | k''k''' \rangle$ в соответствие линии взаимодействия (вершине), в которую входят направленные линии k'', k''' , а линии k, k' выходят.

2) Поставьте множитель $\exp\{(u - \omega)(\epsilon_k - \mu)\}$ в соответствие направленной линии k , начинающейся в момент „времени“ ω и кончающейся в момент „времени“ u .

3) Поставьте множитель f_k в соответствие линии k со стрелкой, направленной вниз.

4) Поставьте множитель $(1 - f_k)$ в соответствие линии k со стрелкой, направленной вверх.

5) Поставьте множитель $(-1)^{h+l}$ в соответствие диаграмме, на которой имеются l замкнутых петель и h линий дырок.

Вклад в Z_G/Z_G^0 можно вычислить путем интегрирования произведения полученных множителей по „временам“ $u_1 \dots u_n$ в пределах $\beta > u_1 > \dots > u_n$ и суммирования по различным состояниям k, k' и т. д. Кроме того, для диаграммы n -го порядка нужно умножить результат на $(-1)^n$.

Эти правила совпадают с приведенными в гл. 4, за исключением статистических множителей, появление которых, как мы уже видели, связано с тем, что состояние k с вероятностью f_k является занятым и с вероятностью $(1 - f_k)$ — незанятым.

5. Зависимость вкладов от объема

Теперь по причинам, подробно рассмотренным в гл. 4, важно определить зависимость различных вкладов от объема. Для этого отметим, что каждый матричный элемент дает множитель, пропорциональный $1/\Omega$, и что каждое суммирование по k дает множитель, пропорциональный Ω .

Особо рассмотрим связную диаграмму (в смысле гл. 4), которая дает вклад в Z_G/Z_G^0 и в которой имеется n линий взаимодействия и $2n$ направленных линий.

Зависимость от Ω вклада такой диаграммы определяется, во-первых, множителем $1/\Omega^n$, связанным с линиями взаимодействия, во-вторых, множителем $\Omega^{2n-(n-1)}$, связанным с суммированием по импульсным состояниям. Показатель $2n - (n - 1)$ обусловлен тем, что из $2n$ возможных суммирований по импульсам $n - 1$ не проводятся из-за закона сохранения импульса при $n - 1$ взаимодействии. При последнем n -м взаимодействии закон сохранения выполняется автоматически. Тогда, как и в гл. 4, мы приходим к важному результату о том, что вклады связных диаграмм пропорциональны Ω .

Конечно, в общем случае диаграммы, соответствующие членам разложения Z_G/Z_G^0 , могут иметь и несвязные части. С помощью рассуждений, аналогичных использованным в гл. 4, можно получить теорему, согласно которой вклад в Z_G/Z_G^0 всех

диаграмм равен экспоненте вкладов всех связных диаграмм. Таким образом, находим, что ряд для $\ln Z_G/Z_G^0$ состоит только из связных диаграмм, вклады которых пропорциональны Ω (к такому выводу можно также прийти и из чисто физических соображений). Окончательно можно записать

$$\ln Z_G = \ln Z_G^0 + \sum_0^{\infty} (-1)^r \int_{\beta > u_1 > u_2 > \dots > u_r > 0} du_1 \dots du_r \times \\ \times \langle \langle V(u_1) \dots V(u_r) \rangle \rangle_{\text{св}}, \quad (3.4)$$

где индекс „св“ означает, что нужно учитывать только связные диаграммы.

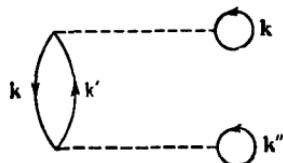
§ 4. СВЯЗЬ С ТЕОРИЕЙ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Диаграммы теории возмущения для основного состояния, соответствующие двум первым порядкам, изображены на фиг. 98. При разложении $\ln Z_G$ членам первого и второго порядков соответствуют диаграммы не только такого типа



Фиг. 98.

(и полученные из них так называемые обменные диаграммы), но и диаграммы типа изображенной на фиг. 99. В теории возмущений для основного состояния такие диаграммы не



Фиг. 99.

могут возникать в связи с тем, что или $k' < k_f$, и, следовательно, не может быть линии частицы с импульсом k' , или $k' > k_f$ и, следовательно, не может быть линии дырки с импульсом k' (ср. стр. 130).

В рассматриваемом случае конечной температуры могут существовать линии частицы и дырки с одним и тем же значением импульса. Это связано с тем, что любое одночастичное

состояние заполнено лишь частично. В соответствии с перечисленными ранее правилами вклад в $\ln Z_G$ диаграммы на фиг. 99 равен

$$\begin{aligned} & (-1)^2 \sum_{kk'k''} \langle k'k'' | v | k'k'' \rangle \langle kk' | v | kk' \rangle f_{k'}(1 - f_{k'}) f_k f_{k''} (-1)^{3+3} \times \\ & \cdot \times \int_0^\beta du_2 \int_0^{u_2} du_1 \exp \{-(u_1 - u_2) \epsilon_{k'}\} \exp \{-(u_2 - u_1) \epsilon_{k'}\} = \\ & = \sum_{kk'k''} f_k f_{k'} f_{k''} (1 - f_{k'}) \langle k'k'' | v | k'k'' \rangle \langle kk' | v | kk' \rangle. \end{aligned}$$

Этот вклад в общем случае остается конечным даже в пределе нулевой температуры, и поэтому необходимо быть осторожным при вычислении свойств при нулевой температуре путем предельного перехода $T \rightarrow 0$ в соответствующих величинах. Физическая картина в обоих случаях не должна обязательно совпадать.

Так, при рассмотрении основного состояния вычисляются свойства системы с фиксированным числом частиц N , в то время как в случае конечной температуры исследуется система с фиксированным химическим потенциалом; при этом вычисляются средние свойства огромного количества возможных конфигураций с различным числом частиц. Единственное ограничение состоит в том, чтобы среднее число частиц в этих конфигурациях было равно N . Подробное исследование вопроса о том, как производить предельный переход $\beta \rightarrow \infty$, уело бы нас слишком далеко от основной темы, поэтому мы ограничимся ссылками на обзор Блоха [22], а также на работы Кона и Латтинжера [115] и Латтинжера и Уорда [136].

§ 5. ДРУГОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

Произведем небольшое обобщение гамильтониана, с которым мы до сих пор работали, а именно запишем его в виде

$$H^\varepsilon = H_0 + gV,$$

где g — константа взаимодействия, которую в конечном итоге можно положить равной единице и получить первоначальный случай. При этом мы получаем также обобщение большой статистической суммы

$$Z_G^\varepsilon = \text{Sp} [\exp \{aN - \beta H_0 - \beta gV\}]. \quad (5.1)$$

Используя свойство инвариантности шпера от произведения операторов относительно циклической перестановки этих опе-

раторов под знаком шпера, можно получить

$$g \frac{\partial Z_G^g}{\partial g} = -\beta \text{Sp} [\exp \{(aN - \beta H^g\} gV]. \quad (5.2)$$

Разложение $g(\partial Z_G^g/\partial g)$ можно теперь произвести таким же способом, как это делалось для Z_G в § 3. Такое разложение будет состоять из всех возможных замкнутых диаграмм, в которых одно взаимодействие совершается в нулевой момент „времени“.

Общая диаграмма n -го порядка будет состоять из нескольких связных частей, не соединенных между собой никакими линиями взаимодействия. При этом вклады от отдельных частей перемножаются. Одна из связных частей диаграммы содержит взаимодействие в нулевой момент „времени“. Остальные связные части являются компонентами разложения Z_G . Если мы рассмотрим все диаграммы, входящие в разложение $g(\partial \ln Z_G^g/\partial g)$, и возьмем все возможные комбинации всех связных частей, содержащих взаимодействие в нулевой момент „времени“, со всеми остальными членами разложения Z_G , то получим все диаграммы, входящие в разложение $g(\partial Z_G^g/\partial g)$.

Таким образом, количество необходимых диаграмм очень сильно уменьшится, если рассматривать не $g(\partial Z_G^g/\partial g)$, а $g(1/Z_G^g)(\partial Z_G^g/\partial g)$. В разложение последней величины входят только связные диаграммы, имеющие одну линию взаимодействия в нулевой момент „времени“.

Отсюда имеем

$$\frac{1}{Z_G^g} g \frac{\partial Z_G^g}{\partial g} = g \frac{\partial}{\partial g} \ln Z_G^g = -\beta \text{Sp} [\exp \{aN - \beta H^g\} gV]_{\text{св}}, \quad (5.3)$$

где индекс „св“ у скобок означает, что следует учитывать только связные диаграммы. В этом и состоит существенное отличие от равенства (5.2), где предполагается суммирование по всем диаграммам.

Интегрируя (5.3) по g , получаем

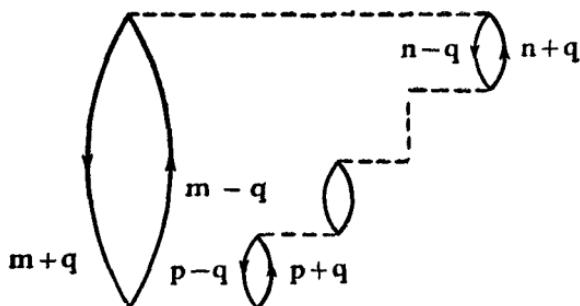
$$\ln Z_G = \ln Z_g^0 - \beta \int_0^1 \frac{dg}{g} \text{Sp} [\exp \{aN - \beta H^g\} gV]_{\text{св}}, \quad (5.4)$$

где Z_G обозначает $[Z_G^g]_{g=1}$.

Правила вычисления вкладов в $\ln Z_G$ различных диаграмм, соответствующих представлению (5.4), легко получить путем видоизменения правил, сформулированных выше, и мы не будем на этом останавливаться.

§ 6. КОЛЬЦЕВЫЕ ДИАГРАММЫ

Поскольку вычисление вкладов в $\ln Z_G$ всех диаграмм разложения (5.4) является необычайно сложной задачей, ограничимся сначала вычислением вкладов одного важного класса диаграмм, так называемых кольцевых диаграмм, введенных в гл. 5. Таким способом можно установить связь рассматриваемого подхода с использованным в гл. 4 и 5. При этом будем в основном следовать методу, использованному Таулемсом [193].



Фиг. 100.

На фиг. 100 изображена типичная кольцевая диаграмма, в каждой вершине которой имеет место взаимодействие пары частица — дырка с одним и тем же изменением импульса, равным $2q$. Характерный матричный элемент имеет вид

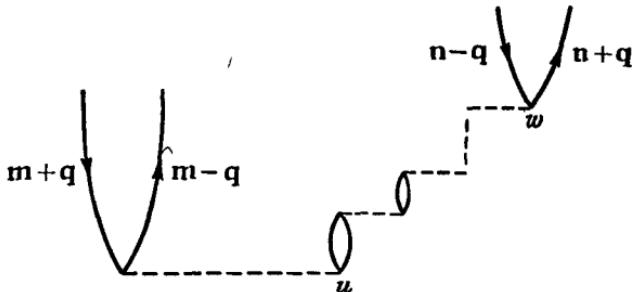
$$\langle m - q, p + q | v | m + q, p - q \rangle = v(2q).$$

Если „устранить“ последнее взаимодействие на диаграмме фиг. 100, то она примет форму, изображенную на фиг. 101. Пропагатор (см. § 3, п. 4) частицы с импульсом k в интервале „времени“ от u до w имеет вид

$$S(k, u - w) = \begin{cases} -f_k \exp \{(\epsilon_k - \mu)(u - w)\}, & u \geq w, \\ (1 - f_k) \exp \{(\epsilon_k - \mu)(u - w)\}, & u < w. \end{cases} \quad (6.1)$$

Диаграмма на фиг. 101 является графическим описанием взаимодействий между парами частица — дырка с одинаковым изменением импульса $2q$ при каждом взаимодействии. В част-

ности, пара частица — дырка в момент „времени“ u обладает импульсом $(m+q, m-q)$. После нескольких актов взаимодействия к моменту „времени“ w пара частица — дырка будет иметь импульс $(n+q, n-q)$. Этот процесс можно описать с помощью пропагаторов, подобно тому, как мы описывали движение свободной частицы пропагатором (6.1). Новый пропагатор частицы — дырки обозначим через $R_{nm}(q, u-w)$.



Фиг. 101.

Пропагатор $R_{nm}(q, u-w)$ определяется суммой кольцевых диаграмм типа изображенной на фиг. 101. Он зависит только от разности $u-w$ и является периодической функцией от t :

$$R_{nm}(q, t-\beta) = R_{nm}(q, t). \quad (6.2)$$

Теперь можно записать интегральное уравнение для R_{nm} . Оно имеет вид

$$R_{nm}(q, u-w) = S(n+q, u-w) S(n-q, w-u) \delta_{nm} - \\ - \sum_p \int_0^\beta S(n+q, y-w) S(n-q, w-y) v(2q) R_{pm}(q, u-y) dy. \quad (6.3)$$

Первый член в правой части соответствует свободному распространению (без взаимодействий) пары частица — дырка.

Для решения интегрального уравнения разложим $R_{nm}(q, u-w)$ в ряд Фурье

$$R_{nm}(q, u-w) \sum_{v=-\infty}^{\infty} R_{nm}(q, v) \exp \left\{ 2\pi i \frac{v}{\beta} (u-w) \right\} \quad (6.4)$$

и подставим это разложение в (6.3). После некоторых преобразований получаем

$$R_{nm}(q, v) = \frac{\operatorname{th}\left(\frac{1}{2}\beta\epsilon'_{n+q}\right) - \operatorname{th}\left(\frac{1}{2}\beta\epsilon'_{n-q}\right)}{2\beta(\epsilon'_{n+q} + \epsilon'_{n-q}) - 4\pi i v} \left[\delta_{nm} + \beta \sum_p v(2q) R_{pm}(q, v) \right], \quad (6.5)$$

где

$$\epsilon'_k = \epsilon_k - \mu. \quad (6.6)$$

Вводя новое обозначение

$$X(q, v) = \sum_n \frac{1}{2} \beta v(2q) [\beta(\epsilon_{n+q} - \epsilon_{n-q}) - 2\pi i v]^{-1} \times \\ \times \left[\operatorname{th}\left(\frac{1}{2} \beta \epsilon'_{n+q}\right) - \operatorname{th}\left(\frac{1}{2} \beta \epsilon'_{n-q}\right) \right], \quad (6.7)$$

находим из (6.5)

$$\beta \sum_{nm} R_{nm}(q, v) v(2q) = X(q, v) - \beta X(q, v) \sum_{pm} v(2q) R_{pm}.$$

Таким образом сразу же можно написать

$$\beta \sum_m \sum_n R_{nm}(q, v) v(2q) = \frac{X(q, v)}{1 + X(q, v)}. \quad (6.8)$$

Теперь нетрудно догадаться, что выражение

$$- \sum_{nm} R_{nm}(q, u-w) v(2q)$$

представляет собой вклад в $g(\partial/\partial g)(\ln Z_A^0)$ суммы кольцевых диаграмм. (В замкнутой кольцевой диаграмме одна из вершин удаляется и каждая кольцевая диаграмма входит в разложение столько раз, сколько у нее имеется вершин.)

Отсюда находим, что формальное выражение для вклада в $\ln Z_A$ кольцевых диаграмм, соответствующих передаче импульса $2q$, имеет вид

$$- \ln [1 + X(q, v)]. \quad (6.9)$$

Чтобы не учитывать разрыва функции $S(k, u-w)$ при $u=w$, вычтем из (6.9) вклад диаграммы первого порядка. Тогда окончательный результат можно записать в виде

$$[\ln Z_A]_R = \ln Z_A^0 - \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \sum_{v=-\infty}^{\infty} \{ \ln [1 + X(q, v)] - X(q, v) \} dq, \quad (6.10)$$

индекс R использован для обозначения того, что в этом выражении учитываются вклады только кольцевых диаграмм второго и более высокого порядков.

При физической интерпретации соотношения (6.10) удобно выписать явную зависимость от постоянной Планка. До сих пор мы фактически использовали систему единиц с $\hbar=1$; чтобы произвести соответствующую модификацию соотношения (6.10), следует заменить $\Omega/(2\pi)^3$ на $\Omega/(2\pi\hbar)^3$.

§ 7. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

При применении соотношения (6.10) к физическим системам для вычисления $X(q, v)$ необходимо явно определить вид потенциала взаимодействия. Рассмотрим теперь электронный газ, который уже обсуждался (для нулевой температуры) в гл. 5.

В уравнение состояния непосредственно входят $\ln Z_G$ [120]:

$$\frac{p\Omega}{k_B T} = \ln Z_G, \quad (7.1)$$

где p — давление. Именно этим соотношением объясняется физический смысл требования, что в разложение $\ln Z_G$ должны входить только члены, пропорциональные Ω . Вычисление (7.1) связано с большими трудностями даже в том случае, когда в правой части учитываются только кольцевые диаграммы, поэтому мы вынуждены ограничиться предельными случаями высоких и низких температур. Кроме того, мы ограничимся системами с таким межчастичным взаимодействием, фурье-компоненты которого имеют вид

$$v(\mathbf{q}) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2 e^2}{q^2}. \quad (7.2)$$

Исследуем сначала классический предельный случай Дебая — Хюккеля.

1. Предельный случай Дебая — Хюккеля

В случае Дебая — Хюккеля в сумме (6.10) нужно учитывать вклад единственного члена, а именно члена с $v=0$. Кроме того, существенной является лишь область малой передачи импульса, в которой при $q \rightarrow 0$

$$X(\mathbf{q}, v) \sim \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2 e^2}{q^2} e^{\alpha \hbar^{-3}} \left(\frac{m}{\beta}\right)^{1/2} \beta = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\hbar} \frac{e^2}{q^2} z \left(\frac{m}{\beta}\right)^{1/2} \beta, \quad (7.3)$$

где $z = e^\alpha$.

При этом $\ln Z_G^0$ определяется известным соотношением для идеального газа Максвелла — Больцмана

$$\ln Z_G^0 = \frac{m^{1/2}}{\hbar} z \Omega (2\pi\beta)^{-1/2}. \quad (7.4)$$

Подставляя эти результаты в (6.10), находим

$$\beta p \Omega = \frac{m^{1/2}}{\hbar^3} z \Omega (2\pi\beta)^{-1/2} + \frac{\Omega \hbar^{-3}}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \{xz - q^2 \ln(1 + xzq^{-2})\} dq, \quad (7.5)$$

где мы ввели обозначение

$$x = e^2 \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \beta \hbar^{-1} \left(\frac{m}{\beta}\right)^{1/2}. \quad (7.6)$$

Интеграл по q теперь можно непосредственно вычислить; его значение равно $(\pi/3)(xz)^{3/2}$. Следовательно,

$$\beta p \Omega = z \Omega \hbar^{-3} \left(\frac{2\pi\beta}{m} \right)^{-1/2} + \frac{\Omega \hbar^{-3}}{(2\pi)^3} \frac{\pi}{3} \left\{ z e^2 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \beta \hbar^{-1} \left(\frac{m}{\beta} \right)^{3/2} \right\}^{3/2}. \quad (7.7)$$

Как обычно, фугативность z связана с плотностью ρ соотношением

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{z}{\Omega} \frac{\partial}{\partial z} \ln Z_G = \\ &= \frac{z \hbar^{-3}}{(2\pi)^{3/2} (\beta/m)^{3/2}} + \frac{\pi \hbar^{-3}}{2(2\pi)^2} \left\{ z e^2 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \beta \hbar^{-1} \left(\frac{m}{\beta} \right)^{3/2} \right\}^{3/2}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Очевидно, что, выключив взаимодействие, т. е. положив $e \rightarrow 0$, мы получим известный результат для идеального газа

$$z_0 = \hbar^3 \left(\frac{2\pi\beta}{m} \right)^{3/2} \rho. \quad (7.9)$$

Решая теперь (7.8) относительно z с точностью до $O(e^2)$, сразу получаем

$$z = \hbar^3 \left(\frac{2\pi\beta}{m} \right)^{3/2} \rho \{1 - \pi^{1/2} e^2 \beta^2 \rho^{1/2} + O(e^4)\}. \quad (7.10)$$

Подставляя выражение (7.10) для z в (7.7), приходим к окончательному результату

$$\beta p = \rho \left\{ 1 - \left(\frac{1}{3} \pi^{1/2} \right) e^3 \beta^{3/2} \rho^{1/2} \right\}. \quad (7.11)$$

Это классическое уравнение состояния Дебая — Хюккеля. Следует отметить, что можно рассматривать (7.11) как разложение по величине $(e^2 \beta \rho^{1/2})$, которая в этом пределе является соответствующим безразмерным параметром разложения. Таким образом, мы убеждаемся в том, что разложение по e^2 с необходимостью является разложением по малой плотности.

Теперь сопоставим полученный результат с квантовомеханическим пределом при $\beta \rightarrow \infty$. В последнем случае, очевидно, постоянная Планка должна войти в соответствующую безразмерную комбинацию переменных. Очевидно, таким параметром разложения при $T \rightarrow 0$ (см. гл. 6) является $(me^2/\hbar^2 \rho^{1/2})$. На этот раз разложение по e^2 будет разложением при большой плотности. Интересно отметить, что идеальный квантовый газ фермионов обладает высокой плотностью, в отличие от идеального классического газа, который существует только при низких плотностях. Специфика фермионной проблемы определяется, конечно, принципом Паули. Проиллюстрируем эти замечания вычислениями, причем снова будем исходить из (7.1).

2. Предельный случай Гелл-Манна и Бракнера

Воспользуемся тем, что в пределе $q \rightarrow 0$, который снова, как и в гл. 5, соответствует преобладанию малой передачи импульса, имеет место соотношение

$$X(q, v) = 2\pi m \hbar^{-3} (2\pi)^{-1/2} v(q) p_0 \left(1 - v \operatorname{arctg} \frac{1}{v} \right), \quad (7.12)$$

в котором $v = 2\pi m k / \beta q p_0$, а p_0 определяется из равенства

$$z = e^{\frac{1}{\mu\beta}} = \exp \left\{ \frac{\beta p_0^2}{2m} \right\}. \quad (7.13)$$

Теперь из (6.10) имеем

$$\ln Z_G = \ln Z_G^0 + \frac{1}{2} \Omega (2\pi\hbar)^{-3} \int 4\pi q^2 dq \sum_v \{ 2X(q, v) - \ln [1 + 2X(q, v)] \}, \quad (7.14)$$

где множитель 2 перед $X(q, v)$ возникает из-за учета спинового вырождения. При $\beta \rightarrow \infty$, т. е. $T \rightarrow 0$, переменная v становится непрерывной, причем $dv = 2\pi m / \beta q p_0$. Тогда с учетом соотношения

$$X(q, v) = \frac{2me^2 p_0}{\hbar^2 q^2 \pi} R(v), \quad (7.15)$$

где

$$R(v) = 1 - v \operatorname{arctg} \frac{1}{v}, \quad (7.16)$$

вводя $q = p_0 Q$, получаем

$$\begin{aligned} \ln Z_G &= \ln Z_G^0 + \Omega (2\pi\hbar)^{-3} \beta p_0^5 m^{-1} \times \\ &\times \int_0^\infty Q^3 dQ \int_{-\infty}^\infty \left\{ \frac{4me^2}{\hbar\pi Q^2 p_0} R(v) - \ln \left[1 + \frac{4me^2}{\pi\hbar p_0 Q^2} R(v) \right] \right\} dv. \end{aligned} \quad (7.17)$$

a) Внутренняя энергия. Теперь из большой статистической суммы можно обычным способом получить внутреннюю энергию, дифференцируя $\ln Z_G$ по β при постоянном z .

б) Плотность. Плотность можно найти, дифференцируя $\ln Z_G$ по $\beta\mu = \ln z = (\beta p_0^2 / 2m)$ при фиксированном β . Для этого подставим в (7.17)

$$p_0 = \left(\frac{2m\mu}{\beta} \right)^{1/2}. \quad (7.18)$$

Дифференцируя и исключая μ из этих двух соотношений, можно получить энергию основного состояния, приходящуюся на одну частицу.

в) Корреляционная энергия. Обозначая двойной интеграл в (7.17) через I , получаем

$$\frac{E}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z_G}{\partial \beta} = [2pm(2\pi\hbar)^3]^{-1} \left[\frac{8\pi p_0^2}{5} + 3I \left(\frac{2m\mu}{\beta} \right)^{5/2} \right] \quad (7.19)$$

и плотность равна

$$\rho = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial \ln Z_G}{\partial \mu} = [2m(2\pi\hbar)^3]^{-1} \left[\frac{16m\pi p_0^3}{3} + \frac{5\beta}{\mu} \left(\frac{2m\mu}{\beta} \right)^{5/2} I \right]. \quad (7.20)$$

Теперь предположим, что $p_0 = p_f + \delta p_0$, где p_f — обычный импульс Ферми, $p_f = \hbar(3\pi^2\rho)^{1/3}$. Тогда изменение приходящейся на одну частицу энергии основного состояния из-за кулоновского взаимодействия определяется соотношением

$$E_{\text{корр}} = \Delta \left(\frac{E}{N} \right) = \frac{[4\pi(\delta p_0/p_f) + 5/2] p_f^5}{m\beta(2\pi\hbar)^3}. \quad (7.21)$$

С другой стороны, чтобы удовлетворялось соотношение (7.20), нужно взять

$$\frac{\delta p_0}{p_f} = -\frac{5}{8\pi} I, \quad (7.22)$$

откуда

$$E_{\text{корр}} = -\frac{3Ip_f^2}{8\pi m}. \quad (7.23)$$

Учитывая определение интеграла I и используя результаты, полученные в приложении IV, можно показать, что это соотношение представляет собой формулу Гелл-Манна и Бракнера.

Итак, было показано, что интегральная формула (6.10) разложения по кольцевым диаграммам, с одной стороны, дает известную теорию Дебая — Хюккеля, а с другой стороны, позволяет вычислить корреляционную энергию электронного газа высокой плотности. Многие исследователи затратили значительные усилия, пытаясь обобщить теорию возмущений на более высокий порядок. Однако нам нужны более точные приближенные решения уравнения Блоха, не использующие теорию возмущений. Такие решения пока не получены. Подобные методы сейчас разрабатываются, к сожалению, только для одночастичного приближения, а решение соответствующего многочастичного интегрального уравнения, по-видимому, долго не будет найдено.

ЗАДАЧИ

9.1. Вычислить с помощью теории Дебая — Хюккеля свободную и внутреннюю энергию классического электронного газа

9.2. Для низкотемпературного электронного газа вычислить зависимость от температуры статической диэлектрической проницаемости $\epsilon(k, 0)$. Как связаны эти вычисления с расчетом теплоемкости разбавленного металлического сплава?

ФУНКЦИИ ГРИНА

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Из всех методов, развитых к настоящему времени в теории многих тел, метод функций Грина является наиболее мощным и универсальным. Одночастичная функция Грина, рассматриваемая в § 2–7, позволяет непосредственно получить спектр одночастичных возбуждений, который важен, как мы убедились в предыдущих главах, для объяснения низкотемпературных свойств системы. Кроме того, существуют теоремы, позволяющие выразить через функции Грина различные физические величины, как, например, полную энергию и распределение по импульсам.

Двухчастичная функция Грина позволяет, в частности, определить коллективные возбуждения системы; с этим вопросом мы подробно ознакомимся в § 8–12. Здесь следует отметить, что двухчастичные функции Грина появляются также в теории, учитывающей взаимодействия между квазичастицами. На этом основан более фундаментальный подход [119] к теории фермийжидкости Ландау, рассмотренной феноменологически в гл. 5. Несмотря на то что изложение такой теории было бы естественным обобщением материала настоящей главы, мы не будем рассматривать эту проблему, детальное исследование которой читатель может найти в книге Нозьера [156].

Наиболее непосредственно теория применяется к нормальным ферми-системам, однако при небольшой модификации, заключающейся в учете аномальных функций Грина, ее можно использовать и для имеющих конденсат как бозе-, так и ферми-систем (см. § 14). До § 13 включительно мы будем развивать формализм, пригодный только для ферми-систем. Только после этого будут рассмотрены необходимые модификации, позволяющие применять его к бозе-системам.

Кроме того, метод функций Грина можно обобщить на случай конечных температур; этому посвящен § 13.

Практически очень часто вычисление многочастичных функций Грина производится с помощью теории возмущений. Мы тоже в основном будем пользоваться этим методом. Для этого удобнее работать в k -пространстве, чем в координатном про-

странстве. Кроме того, функции Грина зависят или от времени, или от энергии; скажем несколько слов о роли этих аргументов. Прежде всего отметим, что наиболее естественно и просто теория излагается во временных переменных; это положение сохраняется до тех пор, пока мы не получим теорему о разложении по связным диаграммам. После этого более предпочтительными становятся функции Грина в энергетических переменных, с помощью которых наши результаты будут представлены в форме, удобной для практических расчетов.

Очень важную роль играет также метод уравнения движения Мартина и Швингера [145]. В этом случае удобно работать в (\mathbf{r}, t) -пространстве. Такой подход будет использован для развития температурной техники в § 13.

§ 2. ОПРЕДЕЛЕНИЯ И ОБОБЩЕНИЯ

Введем обозначение

$$a_{\mathbf{k}t} = e^{iHt} a_{\mathbf{k}} e^{-iHt}, \quad a_{\mathbf{k}t}^+ = (a_{\mathbf{k}t})^\dagger. \quad (2.1)$$

Таким образом, $a_{\mathbf{k}t}$ является зависящим от времени гейзенберговским оператором. Соответствующий ему шредингеровский не зависящий от времени оператор $a_{\mathbf{k}}$ определен на базисе плоских волн. Не следует смешивать $a_{\mathbf{k}t}$ с оператором $a_{\mathbf{k}}(t)$, введенным в гл. 4 соотношением (4.7.2)

$$a_{\mathbf{k}}(t) = e^{iH_0 t} a_{\mathbf{k}} e^{-iH_0 t}, \quad (2.2)$$

где H_0 — только кинетическая энергия, являющаяся частью H .

Одночастичная функция Грина определяется следующим образом:

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = i \langle \Psi_n(0) | T \{ a_{\mathbf{k}t_2} a_{\mathbf{k}t_1}^\dagger \} | \Psi_n(0) \rangle, \quad (2.3)$$

где T — оператор хронологического упорядочения, определяемый, как и ранее, $\Psi_n(0)$ — гейзенберговское не зависящее от времени точно нормированное (чему соответствует индекс n) основное состояние N -частичной системы. Следовательно, можно записать

$$H\Psi_n(0) = E\Psi_n(0), \quad \langle \Psi_n(0) | \Psi_n(0) \rangle = 1. \quad (2.4)$$

В теории одночастичной функции Грина удобно рассматривать \mathbf{k} как индекс, обозначающий одновременно импульс и спин. В тех случаях, когда это не может привести к недоразумениям, мы будем пользоваться индексом \mathbf{k} только для указания импульса. Например, $k < k_f$ означает, что состояние \mathbf{k} лежит ниже уровня Ферми. Используемые здесь обозначения k и \mathbf{k} не имеют ничего

общего с вспомогательной переменной K , которая далее будет введена подобно тому, как это было сделано в гл. 4.

Часто соотношение (2.3) записывают в более явной форме

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = G^{(r)}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) + G^{(a)}(\mathbf{k}, t_2 - t_1), \quad (2.5)$$

где

$$G^{(r)}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \begin{cases} i \langle \Psi_n(0) | a_{\mathbf{k}t_2} a_{\mathbf{k}t_1}^\dagger | \Psi_n(0) \rangle & \text{при } t_2 - t_1 > 0, \\ 0 & \text{при } t_2 - t_1 < 0, \end{cases} \quad (2.6)$$

$$G^{(a)}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \begin{cases} 0 & \text{при } t_2 - t_1 > 0, \\ -i \langle \Psi_n(0) | a_{\mathbf{k}t_1}^\dagger a_{\mathbf{k}t_2} | \Psi_n(0) \rangle & \text{при } t_2 - t_1 < 0. \end{cases} \quad (2.7)$$

Функции $G^{(r)}$ и $G^{(a)}$ называют соответственно запаздывающей и опережающей функциями Грина.

Записывая G в виде функции от одного временного аргумента, мы тем самым полагаем, что правая часть (2.3) зависит только от разности $t_2 - t_1$. В этом нетрудно убедиться. Действительно, при $t_2 > t_1$ (2.3) принимает вид

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) &= i \langle \Psi_n(0) | \{e^{iHt_2} a_{\mathbf{k}} e^{-iHt_2}\} \{e^{iHt_1} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-iHt_1}\} | \Psi_n(0) \rangle = \\ &= ie^{iE(t_2-t_1)} \langle \Psi_n(0) | a_{\mathbf{k}} e^{-iH(t_2-t_1)} a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Psi_n(0) \rangle = \\ &= i \langle \Psi_n(0) | a_{\mathbf{k}} e^{-i(H-E)(t_2-t_1)} a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Psi_n(0) \rangle. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Аналогично обстоит дело и в случае $t_2 < t_1$.

Сделаем некоторые дополнительные замечания к определению (2.3). Во-первых, как мы видели ранее, чтобы описывать распространение и частицы и дырки, необходимо иметь возможность менять местами два оператора $a_{\mathbf{k}t}$. Использование для этой цели оператора T , а не другого оператора, например P , связано только с математическим удобством. На определенной стадии нам придется исследовать ряд теорий возмущений, а, как мы видели в гл. 4, оператор T наиболее удобен для этой цели. Во-вторых, следует обратить внимание на зависимость выражения (2.8) от энергий возбуждения. При изучении функций Грина не нужно знать характеристики основного состояния (в частности, его энергию).

Фурье-образ функции $G(\mathbf{k}, t)$ по времени тоже называют (хотя иногда это может привести к недоразумению) одночастичной функцией Грина. Приведем его точное определение

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G(\mathbf{k}, t) e^{i\omega t}, \quad (2.9)$$

$$G(\mathbf{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega t}. \quad (2.10)$$

Как уже упоминалось в § 1, для приложений часто $G(\mathbf{k}, \omega)$ является более удобной формой, чем $G(\mathbf{k}, t)$.

Невозмущенные функции Грина, обозначаемые индексом 0, определяются для случая $H = H_0$. При этом $|\Psi_n(0)\rangle$ является основным состоянием системы независимых фермионов, т. е. $|\Psi(-\infty)\rangle$ в обозначениях гл. 4. Мы видели в гл. 4, что функции G_0 очень удобны в теории возмущений; еще более важную роль играют эти функции в теории многочастичных функций Грина. Функция $G_0(\mathbf{k}, t)$ уже была вычислена. Действительно, выполняя указанные выше преобразования, выражение (2.3) приводим к виду (4.13.16) и (4.13.17):

$$G_0(\mathbf{k}, t) = \begin{cases} \pm ie^{-i\epsilon_k t} & (+ \text{ при } t > 0 \text{ и } k > k_f, \\ & - \text{ при } t < 0 \text{ и } k < k_f), \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (2.11)$$

Фурье-преобразование этой формулы дает

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega \mp i0} \quad \text{при } k \geq k_f, \quad (2.12)$$

в чем нетрудно убедиться, доказав, что выражение

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega \mp i0} \quad \text{при } k \geq k_f \quad (2.13)$$

эквивалентно правой части (2.11). При $t > 0$ выражение (2.13) можно вычислить, замыкая контур интегрирования полуокружностью в верхней полуплоскости, а при $t < 0$ — полуокружностью в нижней полуплоскости. От выбора знака $\mp i0$ зависит, дает ли полюс в каждом конкретном случае вклад в вычет. Таким образом, мы получаем (2.11).

Невозмущенные функции Грина играют важную роль в связи с тем, что через них при помощи теории возмущений выражаются и вычисляются пропагаторы систем с взаимодействием. Для этого соотношение (2.12) удобно записать в виде $G_0(\mathbf{k}, \omega) = -(\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega)^{-1}$.

§ 3. КВАЗИЧАСТИЦЫ

До сих пор мы физически не обосновывали введение функции Грина (2.3). Перейдем теперь к этому вопросу.

Запишем (2.3) в виде

$$G(\mathbf{k}, t) = i \langle \Psi_n(0) | e^{iHt} a_{\mathbf{k}} e^{-iHt} a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Psi_n(0) \rangle, \quad t > 0, \quad (3.1a)$$

$$G(\mathbf{k}, -t) = -i \langle \Psi_n(0) | e^{iHt} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-iHt} a_{\mathbf{k}} | \Psi_n(0) \rangle, \quad t > 0, \quad (3.1b)$$

и рассмотрим сначала (3.1а). Ясно, что величина $a_k^+ |\Psi_n(0)\rangle$ представляет собой амплитуду вероятности рождения голой частицы с индексом k . Далее, $e^{-iHt} a_k^+ |\Psi_n(0)\rangle$ представляет собой амплитуду вероятности этого состояния по истечении времени t [вследствие того, что формальное решение уравнения движения типа (4.4.1) имеет вид $\Phi(t) = e^{-iHt}\Phi(0)$].

Далее, $a_k e^{-iHt} a_k^+ |\Psi_n(0)\rangle$ описывает амплитуду вероятности уничтожения в момент времени t состояния, возникшего в нулевой момент времени. Если не происходит рождения частицы в начальный момент времени и ее уничтожения в момент t , то система переходит в состояние $e^{-iHt} |\Psi_n(0)\rangle$. Следовательно, амплитуда вероятности обнаружить исходное состояние многочастичной системы при введении в нулевой момент голой частицы и ее устраниния в момент t просто равна

$$\{e^{-iHt} |\Psi_n(0)\rangle\}^\dagger \{a_k e^{-iHt} a_k^+ |\Psi_n(0)\rangle\},$$

что совпадает с (3.1а) с точностью до тривиального множителя i .

Аналогично из (3.1б) ясно, что при $t > 0$ функция $G(k, -t)$ является амплитудой вероятности того, что многочастичная система остается невозмущенной, если в нулевой момент времени произошло уничтожение, а в последующий момент t — рождение частицы с импульсом k . В случае фермионов это соответствует распространению дырки. Таким образом, по своему смыслу функции Грина описывают распространение возмущений такого рода, поэтому их называют также пропагаторами, или функциями распространения.

Из вышесказанного следует, что (2.11) представляют собой подобные амплитуды вероятности для случая невзаимодействующих частиц. Эти выражения легко поддаются интерпретации. Рождение частицы (или дырки) в начальный момент может быть разрешено или запрещено в силу очевидных требований, вытекающих из принципа Паули. В первом случае рожденная частица (или дырка) находится в возбужденном состоянии бесконечно долго, не рассеиваясь на других частицах, а ее уничтожение не влияет на движение частиц.

В системе с взаимодействием описанная картина изменяется следующим образом. Во-первых, вероятность рождения голой частицы в системе не равна точно нулю или единице. Она, очевидно, выражается через функцию распределения по импульсам n_k и равна $1 - n_k$; последняя величина не мала, если модуль разности $k - k_f$ мал. Во-вторых, даже если произошло рождение частицы, она при последующем движении будет

взаимодействовать с другими частицами системы, что приведет к дальнейшему уменьшению амплитуды функции Грина, как это следует из проведенных выше рассуждений. Однако при некоторых описанных ниже условиях уменьшение происходит достаточно медленно, что позволяет нам предполагать нечто подобное движению частицы. В этом случае мы говорим, что в целом частица вместе с окружающей ее поляризованной средой соответствует квазичастице. Очевидно, что для ярко выраженных квазичастиц разность $k - k_f$ должна быть мала. В первом приближении для системы фермионов из одной только статистики следует, что время жизни [Γ_k^{-1} в (3.3)] квазичастиц пропорционально величине $(k - k_f)^{-2}$. В принципе это очень не сложно показать (см. книгу Абрикосова, Горькова и Дзялошинского [4], стр. 30–31). Можно считать, что слабо возбужденное многочастичное состояние образовано некоторым распределением таких квазичастиц, причем число последних мало по сравнению с полным числом голых частиц, образующих систему. Таким образом, каждая область поляризации, образующая квазичастицу, вообще говоря, хорошо определена и не перекрывается с другими такими областями. Отсюда следует в первом приближении, что подобная система ведет себя как разреженный газ. Считается, что каждая отдельная квазичастица рождается, а затем распадается, но в целом этот процесс приводит к установлению некоторой средней заселенности. Подобными представлениями мы уже пользовались в предыдущих частях книги (особенно в гл. 5, 7 и 8).

Мы не будем придерживаться традиционного способа рассмотрения этих явлений, основанного на применении к спектральному представлению (2.8) методов теории функций комплексного переменного. Вместо этого будет выбран более pragmaticический подход, основанный на использовании результатов вычисления функции Грина методом теории возмущений. Мы увидим, что для нормальных (т. е. не сверхтекущих) систем пропагатор можно представить в виде

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\epsilon_k - \omega - M(k, \omega)}, \quad (3.2)$$

где $M(k, \omega)$ – некоторая определенная ниже гладкая функция, называемая дайсоновской неприводимой (или собственной) собственно-энергетической частью¹). Как следует из (2.12), она обращается в нуль для невзаимодействующих частиц. Сделаем

¹) Неприводимая собственно-энергетическая часть называется также массовым оператором. – Прим. ред.

теперь предположение, которое подтверждается практически и состоит в том, что при любых $k \geq k_f$ выражение (3.2) настолько близко к (2.12), что $G(k, \omega)$ можно аналитически продолжить в нижнюю (верхнюю) полуплоскость, причем она будет иметь простой полюс вблизи действительной оси, расположенный ниже (выше) этой оси в точке

$$\omega = \xi_k = \epsilon_k - i\Gamma_k \quad (\Gamma_k \geq 0), \quad (3.3)$$

определенной уравнением

$$\epsilon_k - \omega - M(k, \omega) = 0. \quad (3.4)$$

Сказанного будет вполне достаточно для дальнейшего, хотя к настоящему времени о полюсах функции G известно значительно больше [72, 156, 183].

Для интерпретации полученных результатов лучше перейти в t -пространство. Если $k > k_f$ и $t > 0$, то интеграл (2.10) можно вычислить, замыкая контур интегрирования полуокружностью в нижней полуплоскости. В результате получим сумму членов, соответствующих различным полюсам, причем время затухания каждого из состояний будет зависеть от расстояния между полюсом и действительной осью ω . Отсюда вытекает, что член, определяемый соотношением (3.3), будет доминирующим, и, следовательно, $G(k, \omega) \sim iz_k \exp(-i\epsilon_k t) \exp(-\Gamma_k t)$. Здесь z_k — взятый со знаком минус вычет в точке ξ_k , причем в силу (3.2) имеем

$$z_k = \frac{1}{1 + [\partial M(k, \omega)/\partial \omega]_{\omega=\xi_k}}. \quad (3.5)$$

Если $k > k_f$ и $t < 0$, то контур интегрирования выбирается в верхней полуплоскости. В этом случае, согласно принятой гипотезе, вблизи действительной оси полюсов нет, можно сказать, что имеет место сильное затухание и, следовательно, $G(k, \omega) \sim 0$. Аналогичное рассмотрение можно провести и при $k < k_f$. Представим всю полученную информацию в явном виде с помощью соотношения

$$G(k, t) \sim \begin{cases} 0 & k < k_f \\ iz_k \exp(-i\xi_k t) & k > k_f \\ -iz_k \exp(-i\xi_k t) & k < k_f \\ 0 & k > k_f \end{cases} \left\{ \begin{array}{l} t > 0, \\ k > k_f \\ k < k_f \\ k > k_f \end{array} \right\} t < 0. \quad (3.6)$$

Таким образом, соотношение (3.6) свидетельствует о том, что квазичастичные возмущения с энергией ϵ_k существуют в течение времени Γ_k^{-1} . Действительно, уравнение (3.4) лежит в основе

точного определения в пространстве импульсов поверхности Ферми, внутри которой существуют квазидырки, а снаружи — квазичастицы.

Величина z_{k_f} определяет разрыв на поверхности Ферми функции распределения по импульсам (см. гл. 5, § 10, п. 1). Проводить доказательство мы здесь не будем, а только заметим, что на это указывают соотношения (3.6). Так, если обозначить остаточные члены через $g(k, t)$, то

$$G(k_f + 0, -0) - g(k_f + 0, -0) = -iz_{k_f=0} \quad (3.7)$$

и

$$G(k_f - 0, -0) - g(k_f - 0, -0) = 0. \quad (3.8)$$

Предположив теперь для g и z соответствующие свойства непрерывности, получаем

$$z_{k_f} = n_{k_f+0} - n_{k_f-0}, \quad (3.9)$$

так как

$$G(k, -0) = -i \langle \Psi_n(0) | a_k^+ a_k | \Psi_n(0) \rangle = -in_k. \quad (3.10)$$

Соотношение (3.9) показывает, в частности, что величина z_{k_f} действительна и лежит в пределах $0 \leq z_{k_f} \leq 1$. Верхний предел следует из того, что при любом k в силу принципа Паули $0 \leq n_k \leq 1$, а нижний обусловлен тем, что z_{k_f} не может быть меньше нуля, ибо в противном случае распределение импульсов стало бы энергетически неустойчиво относительно падения частиц обратно в сферу Ферми.

Практически мы вычисляем $M(k, \omega)$ (ниже это будет сделано с помощью теории возмущений) и, подставляя найденные значения в (3.4), находим полюс функции $G(k, \omega)$; таким образом мы определяем энергию квазичастиц и время жизни. Для хорошо определенных квазичастиц величина Γ_k мала. Тогда можно получить решение уравнения (3.4) в виде разложения в ряд Тейлора по Γ_k , что дает

$$\epsilon_k - \epsilon_k - M_0(k, \epsilon_k) = 0 \quad (3.11)$$

и

$$\Gamma_k = \frac{M_1(k, \epsilon_k)}{1 + [\partial M_0(k, \omega)/\partial \omega]_{\omega=\epsilon_k}}. \quad (3.12)$$

где M_0 и M_1 — соответственно действительная и мнимая части M . Отметим, что при выводе соотношений (3.11) и (3.12) мы не предполагали малости действительного смещения $\epsilon_k - \epsilon_k$ полюса от положения, соответствующего системе без взаимодействия.

Из проведенного рассмотрения видно, почему мы так заинтересованы в вычислении одночастичной функции Грина. Она позволяет определить энергию и времена жизни квазичастиц. В заключение настоящего параграфа хотелось бы указать, что, исследовав пропагатор, мы тем самым определяем другую очень важную физическую величину, а именно энергию основного состояния, причем для вычисления последней не нужно никаких отдельных расчетов. Мы ограничимся тем, что приведем окончательную формулу

$$E = \frac{i}{4\pi} \int \frac{2}{(2\pi)^3} d\mathbf{k} \int_C d\omega (\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}) G(\mathbf{k}, \omega), \quad (3.13)$$

где контур C состоит из действительной оси и бесконечной полуокружности в верхней полуплоскости.

Установив связь $G(\mathbf{k}, \omega)$ с важнейшими характеристиками системы, в следующих нескольких параграфах мы покажем, как производится явное вычисление этой функции.

§ 4. ФУНКЦИЯ ГРИНА И U-МАТРИЦА

Напомним некоторые основные свойства U -матрицы, определенной в гл. 4 (см. особенно гл. 4, § 4 и 5).

1) Имеем

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t') |\Psi(t')\rangle, \quad (4.1)$$

откуда следует

$$|\Psi(0)\rangle = U(0, -\infty) |\Psi(-\infty)\rangle = U(0, \infty) |\Psi(\infty)\rangle. \quad (4.2)$$

Кроме того, соответствующий предельный переход дает

$$|\Psi(\infty)\rangle = |\Psi(-\infty)\rangle = |g\rangle. \quad (4.3)$$

2) Для консервативных систем (которыми мы ограничивались до сих пор)

$$U(t, t') = e^{iH_0 t} e^{iH(t'-t)} e^{-iH_0 t}. \quad (4.4)$$

(В общем случае это выражение не может быть упрощено, так как экспоненциальные операторы не аддитивны.) Это позволяет найти связь оператора a_{kt} в гейзенберговском представлении (2.1) с оператором $a_k(t)$ в представлении взаимодействия:

$$a_{kt} = e^{iH_0 t} e^{-iH_0 t} a_k(t) e^{iH_0 t} e^{-iH_0 t} = U(0, t) a_k(t) U(t, 0). \quad (4.5)$$

3) Напомним правило умножения:

$$U(t_1, t_2) = U(t_1, t_3) U(t_3, t_2). \quad (4.6)$$

Теперь воспользуемся этими результатами, чтобы представить функцию G , определяемую соотношением (2.3), в форме, наиболее удобной для применения теории возмущений. Прежде всего из (4.2) и (4.3) следует

$$|\Psi_n(0)\rangle = K^{-1/2} |\Psi(0)\rangle, \quad (4.7)$$

где K — нормирующий множитель. Из условия

$$\langle\Psi_n(0)|\Psi_n(0)\rangle = 1$$

находим

$$K = \langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(\infty)|U(\infty, 0)U(0, -\infty)|\Psi(-\infty)\rangle = \langle g|U(\infty, -\infty)|g\rangle. \quad (4.8)$$

1. Функция Грина в представлении взаимодействия

Предположим сначала, что $t_2 > t_1$. Тогда с помощью (4.2), (4.3), (4.5) и (4.7) определение (2.3) можно представить в виде

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \frac{i}{K} \langle g|U(\infty, 0)\{U(0, t_2)a_{\mathbf{k}}(t_2)U(t_2, 0)\} \times \\ \times \{U(0, t_1)a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t_1)U(t_1, 0)\} U(0, -\infty)|g\rangle; \quad (4.9)$$

используя (4.6) и (4.8), получаем (при $t_2 > t_1$)

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \frac{i \langle g|U(\infty, t_2)a_{\mathbf{k}}(t_2)U(t_2, t_1)a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t_1)U(t_1, -\infty)|g\rangle}{\langle g|U(\infty, -\infty)|g\rangle}. \quad (4.10)$$

Напомним теперь явную форму оператора U [см. (4.5.3) и (4.5.2)]

$$U(t_1, t_2) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_2}^{t_1} dt'_n \dots \int_{t_2}^{t_1} dt'_1 TV(t'_1) \dots V(t'_n). \quad (4.11)$$

Здесь мы опустили скобки, в которые было заключено произведение операторов V , так как в этой главе T -произведение будет использоваться в несколько более общем смысле. Пусть в общем случае $\Omega(t)$ представляет собой оператор, зависящий от времени. Воспользуемся соотношением

$$\{TV(t_1) \dots V(t_n)\}\Omega(t) = T\{V(t_1) \dots V(t_n)\Omega(t)\}. \quad (4.12)$$

До сих пор нам не встречались выражения типа стоящего в левой части (4.12), поэтому, не рискуя нарушить однозначность, мы можем считать, что $TV(t_1) \dots V(t_n) = T\{V(t_1) \dots V(t_n)\}$.

Используя определение (4.12), можно утверждать, что для $t \geq t_2 > t_1$

$$a_k^\dagger(t) U(t_2, t_1) = U(t_2, t_1) a_k^\dagger(t), \quad a_k(t) U(t_2, t_1) = U(t_2, t_1) a_k(t). \quad (4.13)$$

Для доказательства следует показать, что при заданной последовательности значений времени оператор $a_k^\dagger(t)$ [а также $a_k(t)$] коммутирует с каждым T -произведением, входящим в (4.11). Действительно, имеем

$$\begin{aligned} \{TV(t'_1) \dots V(t'_n)\} a_k^\dagger(t) &\equiv T \{V(t'_1) \dots V(t'_n) a_k^\dagger(t)\} = \\ &= (-1)^{4n} T \{a_k^\dagger(t) V(t'_1) \dots V(t'_n)\}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Появление в последнем выражении множителя $(-1)^{4n}$ связано с тем, что каждый из операторов V в представлении вторичного квантования состоит из четырех операторов a , следовательно, переход оператора $a_k^\dagger(t)$ в новое положение состоит из $4n$ перестановок. Заметим теперь, что, согласно определению (4.11), каждое значение t'_i лежит между t_1 и t_2 и, следовательно, меньше t . Таким образом, окончательно (4.14) можно записать как $a_k^\dagger(t) T \{V(t'_1) \dots V(t'_n)\}$, что и доказывает (4.13).

Воспользуемся теперь соотношением (4.13) для исследования функции Грина (4.10). При $t_2 > t_1$ имеем

$$\begin{aligned} U(\infty, t_2) a_k(t_2) U(t_2, t_1) a_k^\dagger(t_1) U(t_1, -\infty) &= \\ &= U(\infty, t_2) U(t_2, t_1) U(t_1, -\infty) a_k(t_2) a_k^\dagger(t_1) = \\ &= U(\infty, -\infty) a_k(t_2) a_k^\dagger(t_1). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Следовательно, (4.10) принимает вид

$$G(k, t_2 - t_1) = \frac{i \langle g | U(\infty, -\infty) a_k(t_2) a_k^\dagger(t_1) | g \rangle}{\langle g | U(\infty, -\infty) | g \rangle} \quad (t_2 > t_1). \quad (4.16)$$

С помощью аналогичных вычислений для иной последовательности времен получаем

$$G(k, t_2 - t_1) = - \frac{i \langle g | U(\infty, -\infty) a_k^\dagger(t_1) a_k(t_2) | g \rangle}{\langle g | U(\infty, -\infty) | g \rangle} \quad (t_1 > t_2). \quad (4.17)$$

Соотношения (4.16) и (4.17) являются определениями G в представлении взаимодействия, благодаря чему мы можем воспользоваться диаграммными методами, развитыми в гл. 4.

Можно записать (4.16) и (4.17) для обоих последовательностей времен в более явном виде

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \\ = \frac{i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt'_n \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \langle g | T \{ V(t'_1) \dots V(t'_n) a_{\mathbf{k}}(t_2) a_{\mathbf{k}}^\dagger(t_1) \} | g \rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt'_n \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \langle g | T \{ V(t'_1) \dots V(t'_n) \} | g \rangle} = \frac{\mathfrak{N}}{\mathfrak{D}}. \quad (4.18)$$

Функцию Грина, записанную в такой форме, можно исследовать методами диаграммной техники.

§ 5. ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ ОДНОЧАСТИЧНОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА

Знаменатель \mathfrak{D} соотношения (4.18) уже был подробно исследован в гл. 4 (изменение пределов интегрирования по времени не влияет существенным образом на диаграммный анализ). Найденных в гл. 4 соотношений вполне достаточно также и для нахождения числителя \mathfrak{N} . Подробно эта операция рассматривается в приложении X; здесь мы приведем лишь наиболее важные детали, необходимые для понимания последующих разделов.

1) Общая диаграмма, соответствующая какому-либо члену из числителя \mathfrak{N} , имеет внешнюю входящую линию [соответствующую оператору $a_{\mathbf{k}}^\dagger(t_1)$] и внешнюю выходящую линию [соответствующую $a_{\mathbf{k}}(t_2)$] вместе с некоторым (возможно, нулевым) числом несвязных (не соединенных между собой) вакуум-вакуумных частей.

2) В соответствии от гл. 4, § 16 вклады от \mathfrak{D} точно сокращаются с членами разложения \mathfrak{N} , содержащими вакуум-вакуумные части.

Отсюда следует простой вывод, что функция G состоит только из вкладов от связных диаграмм, имеющих входящие и выходящие внешние линии и составленных всеми возможными способами.

Таким образом, мы можем установить теорему о разложении по связным диаграммам, аналогичную полученной в гл. 4. Основное ее содержание заключается в том, что функцию Грина $G(\mathbf{k}, t_2 - t_1)$, определенную соотношением (4.18), можно

представить в виде

где использован индекс „св“ для обозначения того, что следует учитывать только различные связные безиндексные диаграммы.

Несмотря на то, что понятие безиндексной диаграммы полностью разъясняется в приложении X, здесь, видимо, все-таки нужно указать его смысл. При дальнейшей разработке теории, изложенной в гл. 4, оказывается, что любые две диаграммы с топологически одинаковой структурой, но с различными индексами $(1, 2), (3, 4), \dots, (2n - 1, 2n)$, обозначающими вершины, дают одинаковый вклад. Топологически одинаковые диаграммы образуют семейства, состоящие из $2^n n!$ диаграмм. Множитель $2^n n!$ сокращается с таким же множителем, обычно имеющимся в знаменателе (5.1), так что при вычислениях достаточно учитывать лишь вклады от одного члена каждого семейства. Этот член, как правило, не обозначается индексами.

Символически (5.1) можно записать в виде суммы диаграмм

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) =$$

$$= \left\{ \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} \right. + \left\{ \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} \right. + \left\{ \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} \right. + \dots \quad (5.2)$$

Нулевой порядок Первый порядок Второй порядок

где (см. § 3) отдельные слагаемые представляют собой символическое изображение различных физических процессов, которые могут произойти с частицей, попавшей в систему многих частиц, до того как она покинет ее.

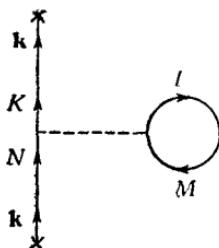
§ 6. ФУРЬЕ-ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Получив удобный ряд теории возмущений для $G(\mathbf{k}, t)$, теперь можно путем почлененного фурье-преобразования найти разложение для $G(\mathbf{k}, \omega)$ — величины, представляющей непосредственный

интерес. Ниже мы увидим, что при этом сильно упрощается математическая сторона дела, так как зацепляющиеся аргументы невозмущенных пропагаторов в t -пространстве расцепляются в ω -пространстве. Здесь снова, прежде чем переходить к общему случаю, рассмотрим более простые примеры.

1. Вклады нулевого и первого порядков

Член нулевого порядка дает вклад, равный $-iG_0(\mathbf{k}, t_2 - t_1)$ [см. приложение X, соотношение (10П.4)], фурье-образ которого есть $G_0(\mathbf{k}, \omega)$. Члены первого порядка могут быть двух типов:



Фиг 102

a) Член прямого взаимодействия. Членом такого типа является первое из двух слагаемых первого порядка в (5.2). Согласно правилам, разобранным в приложении X, его вклад равен (фиг. 102)

$$G_{1d}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_{12} \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle (-1)^l (-i)^3 \delta_{KK} \delta_{KN} \delta_{LM} \times \\ \times G_0(\mathbf{k}, t_2 - t_{12}) G_0(\mathbf{k}, t_{12} - t_1) G_0(L, t_{12} - t_{12}). \quad (6.1)$$

Множитель $(-1)^l$ возникает из-за того, что у диаграммы имеется одна замкнутая петля. Интерпретация функции Грина при нулевом значении времени дана в приложении X [см. (10П.6)], а индексы \mathbf{k} и K здесь совершенно не зависят друг от друга [см. замечания после соотношения (2.41)].

Осуществляя фурье-преобразование соотношения (6.1), получаем

$$G_{1d}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t_2 - t_1) e^{i\omega(t_2 - t_1)} \int_{-\infty}^{\infty} dt_{12} \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle \times \\ \times (-1)^l (-i)^3 \delta_{KK} \delta_{KN} \delta_{LM} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} G_0(\mathbf{k}, \omega_1) G_0(\mathbf{k}, \omega_2) \times \\ \times G_0(L, \omega_3) e^{-i\omega_1(t_2 - t_{12})} e^{-i\omega_2(t_2 - t_1)} e^{-i\omega_3(t_{12} - t_{12})}. \quad (6.2)$$

С помощью соотношения

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} = 2\pi\delta(\omega) \quad (6.3)$$

можно сразу совершить интегрирование по времени. Интегрирование по t_{12} дает множитель $2\pi\delta(\omega_1 - \omega_2)$, а интегрирование по $t_2 - t_1$ дает или $2\pi\delta(\omega - \omega_2)$ или $2\pi\delta(\omega_1 - \omega)$ в зависимости от того, каким путем проводилось интегрирование. Если формально положить $t_1 = 0$ и интегрировать по t_2 , то получится первый из этих двух множителей, а если положить $t_2 = 0$ и интегрировать по t_1 , то — второй. Конечно, в этом нет никакого парадокса, так как три аргумента δ -функций линейно зависимы, вследствие чего можно брать любые два из них.

Таким образом, (6.2) принимает вид

$$G_{1d}(k, \omega) = \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle (-1)^l (-i)^3 \delta_{kk} \delta_{KN} \delta_{LM} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} G_0(k, \omega_1) G_0(k, \omega_2) G_0(L, \omega_3) \times \\ \times 2\pi\delta(\omega - \omega_1) 2\pi\delta(\omega - \omega_2). \quad (6.4)$$

Интегрирование по ω_1 и ω_2 выполняется тривиально, а интеграл по ω_3 равен $-i$ при $L < k_f$ и нулю в противном случае. Действительно, этот интеграл представляет собой просто невозмущенную функцию Грина для нулевого момента времени. Ее значение определяется соотношением (10П.6), обеспечивающим однозначность выражения (2.11) при $t = 0$. Теперь уже нетрудно вычислить (6.4):

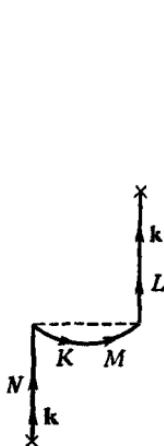
$$G_{1d}(k, \omega) = \left(- \sum_{l < k_f} \langle kL | v | kL \rangle \right) G_0^2(k, \omega) \equiv M_{1d} G_0^2(k, \omega). \quad (6.5)$$

Это выражение используется в качестве определения величины M_{1d} , смысл которой будет выяснен ниже.

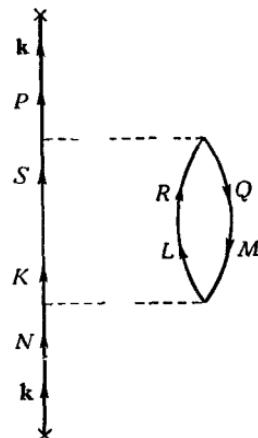
б) Член обменного взаимодействия. Членом такого типа является второй из двух членов первого порядка в сумме (5.2). Его вклад равен (фиг. 103)

$$G_{1e}(k, t_2 - t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_{12} \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle (-1)^0 (-i)^3 \delta_{KN} \delta_{KM} \delta_{LK} \times \\ \times G_0(k, t_{12} - t_1) G_0(K, t_{12} - t_{12}) G_0(k, t_2 - t_{12}). \quad (6.6)$$

Поскольку у диаграммы нет замкнутых петель, возникает множитель $(-1)^0$. Дальнейшие преобразования совершаются ана-



Фиг. 103



Фиг. 104

логично проведенным в п. „а“. Соотношение, подобное (6.4), имеет вид

$$G_{1e}(k, \omega) = \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle (-1)^0 (-i)^3 \delta_{kN} \delta_{KM} \delta_{Lk} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} G_0(k, \omega_1) G_0(k, \omega_2) G_0(K, \omega_3) \times \\ \times \delta(\omega - \omega_1) \delta(\omega - \omega_2), \quad (6.7)$$

которое можно упростить и привести к виду

$$G_{1e}(k, \omega) = \left(\sum_{m < k_f} \langle M k | v | k M \rangle \right) G_0^2(k, \omega) \equiv M_{1e} G_0^2(k, \omega). \quad (6.8)$$

Смысл определяемой таким образом функции M_{1e} станет ясен немного позже.

2. Члены второго порядка

a) Прямая поляризация. Прямой поляризации соответствует первый из членов второго порядка в (5.2). Его вклад равен (фиг. 104)

$$G_{2d}(k, t_2 - t_1) = (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt_{12} \int_{-\infty}^{\infty} dt_{34} \sum_{\substack{KLMN \\ PQRS}} \langle KL | v | NM \rangle \langle PQ | v | SR \rangle \times \\ \times (-1)^1 (-i)^5 \delta_{kN} \delta_{KS} \delta_{kp} \delta_{LR} \delta_{MQ} \times \\ \times G_0(k, t_{12} - t_1) G_0(K, t_{34} - t_{12}) G_0(k, t_2 - t_{34}) \times \\ \times G_0(L, t_{34} - t_{12}) G_0(M, t_{12} - t_{34}). \quad (6.9)$$

На этот раз у диаграммы имеется одна петля. Преобразуя от t - к ω -пространству, получаем

$$\begin{aligned} G_{2d}(\mathbf{k}, \omega) = & (-i) \sum_{\substack{KLMN \\ PQRS}} \langle KL|v|NM\rangle \langle PQ|v|SR\rangle \times \\ & \times (-1)^1 (-i)^5 \delta_{KN} \delta_{KP} \delta_{KS} \delta_{LR} \delta_{MQ} \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_5}{2\pi} G_0(\mathbf{k}, \omega_1) G_0(\mathbf{k}, \omega_2) \times \\ & \times G_0(K, \omega_3) G_0(L, \omega_4) G_0(M, \omega_5) 2\pi\delta(\omega_1 + \omega_5 - \omega_3 - \omega_4) \times \\ & \times 2\pi\delta(\omega_3 + \omega_4 - \omega_2 - \omega_5) 2\pi\delta(\omega - \omega_1). \quad (6.10) \end{aligned}$$

Как и ранее [см. замечания после соотношения (6.3)], в (6.10) любую из дираковских δ -функций можно заменить на $\delta(\omega - \omega_2)$. Таким образом, совершенно просто привести соотношение (6.10) к виду

$$\begin{aligned} G_{2d}(\mathbf{k}, \omega) = & \left(\sum_{KLM} \langle KL|v|kM\rangle \langle kM|v|KL\rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} \times \right. \\ & \left. \times G_0(K, \omega_3) G_0(L, \omega_4) G_0(M, \omega_3 + \omega_4 - \omega) \right) G_0^2(\mathbf{k}, \omega). \quad (6.11) \end{aligned}$$

Теперь можно еще более упростить этот результат. В частности, можно выполнить интегрирование по ω_4 , так как имеем соотношение

$$\begin{aligned} i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} G_0(L, \omega') G_0(M, \omega + \omega') = \\ = \begin{cases} \frac{-1}{\epsilon_M - \epsilon_L - \omega - i0} & (l < k_f < m), \\ \frac{1}{\epsilon_M - \epsilon_L - \omega + i0} & (m < k_f < l), \\ 0 & (\text{в остальных случаях}). \end{cases} \quad (6.12) \end{aligned}$$

Последнее можно доказать непосредственно, используя явное выражение вида (2.12) для G_0 .

С помощью соотношений (1.3.6) можно произвести дальнейшее упрощение, выразив матричные элементы через передаваемый импульс \mathbf{q} . Таким образом, соотношение (6.11) принимает вид

$$\begin{aligned} G_{2d}(\mathbf{k}, \omega) = & \left[\sum_{\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega''}{2\pi} G_0(\mathbf{k}_m - \mathbf{q}, \omega - \omega'') F^{(0)}(\mathbf{q}, \omega'') \right] G_0^2(\mathbf{k}, \omega) = \\ & = M_{2d}(\mathbf{k}, \omega) G_0^2(\mathbf{k}, \omega), \quad (6.13) \end{aligned}$$

где k_m обозначает импульс, соответствующий общему индексу спина — импульса \mathbf{k} , и

$$F^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{|k+q| > k_f > |q|} \frac{1}{\epsilon_q - \epsilon_{k+q} - \omega + i0} - \sum_{|k+q| < k_f < |q|} \frac{1}{\epsilon_q - \epsilon_{k+q} - \omega - i0}, \quad (6.14)$$

причем здесь и в последующем соотношении (6.15) \mathbf{k} , как обычно, представляет собой импульс, соответствующий промежуточному состоянию K . Для функции G_0 в подынтегральном выражении в (6.13) мы использовали условие $G_0(L, \omega) \equiv G_0(I, \omega)$, так как функция G_0 не зависит от спина. Кроме того, мы пользуемся определением (8.3.79), согласно которому $v_q = v(q)/\Omega$, где $v(q)$ (см. гл. 5) есть величина порядка единицы относительно Ω .

Значение второй суммы в (6.14) зависит только от $|k|$ и, следовательно, инвариантно относительно замены $k \rightarrow -k$. Далее, поскольку \mathbf{q} изменяется в неограниченных пределах, можно произвести замену $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{q}$. Таким образом, ограничения, налагаемые на каждую из двух сумм в (6.14), становятся одинаковыми. Итак, после (тривиального) суммирования по значениям спина соотношение (6.14) принимает вид

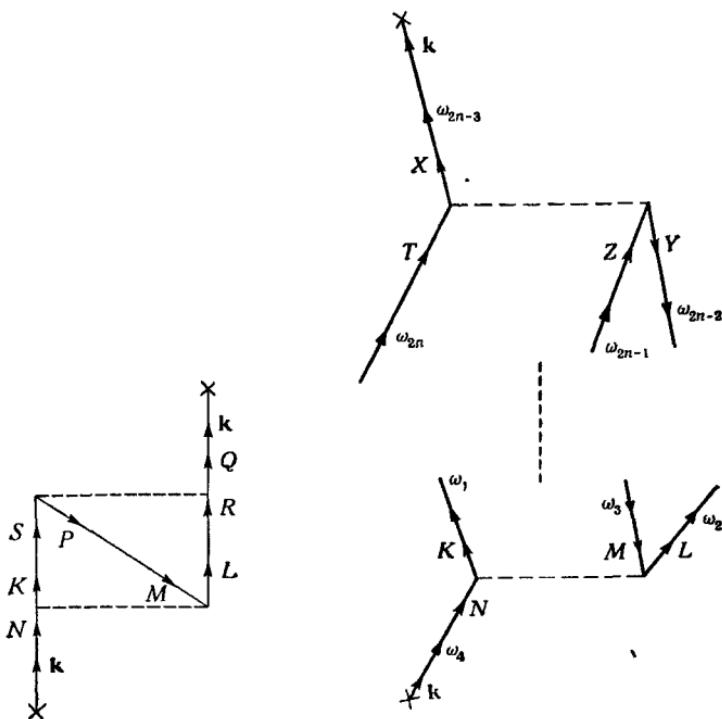
$$F^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = 2 \sum_{|k+q| > k_f > |q|} \left\{ \frac{1}{\omega - (\epsilon_{k+q} - \epsilon_q - i0)} - \frac{1}{\omega + \epsilon_{k+q} - \epsilon_q - i0} \right\}. \quad (6.15)$$

Определяемый этим соотношением множитель $F^0(\mathbf{k}, \omega)$ всегда соответствует „петле“ типа изображенной на фиг. 104 и, как мы увидим ниже, играет важную роль не только в рассматриваемом случае.

б) Обменная поляризация. Обменная поляризация соответствует второму слагаемому из суммы членов второго порядка в (5.2). Запишем соответствующее выражение, зависящее от времени (см. фиг. 105). Преобразуя его таким же образом, как и в предыдущем случае, получаем для процесса подобного типа следующее соотношение, являющееся аналогом соотношения (6.10):

$$\begin{aligned} G_{2e}(\mathbf{k}, \omega) = & (-i) \sum_{\substack{KLMN \\ PQRS}} \langle KL | v | NM \rangle \langle PQ | v | SR \rangle (-1)^0 (-i)^5 \times \\ & \times \delta_{KN} \delta_{kQ} \delta_{KS} \delta_{LR} \delta_{PM} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_5}{2\pi} \times \\ & \times G_0(\mathbf{k}, \omega_1) G_0(\mathbf{k}, \omega_2) G_0(K, \omega_3) G_0(L, \omega_4) G_0(M, \omega_5) \times \\ & \times 2\pi \delta(\omega_1 + \omega_5 - \omega_3 - \omega_4) 2\pi \delta(\omega_3 + \omega_4 - \omega_2 - \omega_5) 2\pi \delta(\omega - \omega_1). \quad (6.16) \end{aligned}$$

Как и ранее, любую дираковскую δ -функцию в этом выражении можно заменить на $\delta(\omega - \omega_2)$. Если, например, заменить таким образом первую дираковскую δ -функцию и проинтегри-



Фиг. 105.

Фиг. 106.

ровать по ω_1 и ω_2 , то получится соотношение, аналогичное (6.11) и имеющее форму произведения двух сомножителей:

$$G_{2e}(\mathbf{k}, \omega) = M_{2e}(\mathbf{k}, \omega) G_0^2(\mathbf{k}, \omega), \quad (6.17)$$

где $M_{2e}(\mathbf{k}, \omega)$ нетрудно записать в явном виде с помощью (6.16). Теперь можно перейти к рассмотрению общего случая.

3. Вклад n -го порядка

На фиг. 106 приведена общая диаграмма n -го порядка, топологическая структура которой обозначается символом a . Следует признать, что изображение конечных вершин в той форме, как это сделано на диаграмме на фиг. 106, несколько уменьшает ее общность, но наши последующие рассуждения не зависят от этого ограничения.

Припишем каждой линии пропагатора переменную ω_i , как это показано фиг. 106. Теперь с помощью диаграммы нетрудно написать математическое выражение для функции $G(\mathbf{k}, \omega)$, полученной после преобразования $G(\mathbf{k}, t_2 - t_1)$:

$$G_{na}(\mathbf{k}, \omega) = i^n (-1)^l \sum_{\substack{KL \\ PQRS}} \langle KL | v | NM \rangle \langle PQ | v | SR \rangle \dots \langle XY | v | TZ \rangle \times$$

$\dot{X}YZT$

$$\times \delta_{kN} \dots \delta_{kX} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_{2n}}{2\pi} G_0(K, \omega_1) G_0(L, \omega_2) \dots$$

$$\dots G_0(Z, \omega_{2n-1}) G_0(T, \omega_{2n}) 2\pi \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \dots$$

$$\dots 2\pi \delta(\omega_{2n-3} + \omega_{2n-2} - \omega_{2n-1} - \omega_{2n}) 2\pi \delta(\omega_{2n-3} - \omega). \quad (6.18)$$

Множитель i^n возникает за счет произведения множителей $(-i)^{n-1}$, входящего в (5.1), и $(-i)^{2n+1}$, возникающего за счет $2n+1$ сверток. Как и ранее, l — число петель, а в связи с линейной зависимостью между аргументами дираховских δ -функций любую из них можно заменить множителем $\delta(\omega - \omega_4)$. Интегрируя затем по двум энергетическим переменным, соответствующим конечной и начальной линиям (на фиг. 106 это ω_4 и ω_{2n-3}), можем записать (6.18) в виде

$$G_{na}(\mathbf{k}, \omega) = M_{na}(\mathbf{k}, \omega) G_0^2(\mathbf{k}, \omega). \quad (6.19)$$

§ 7. НЕПРИВОДИМЫЙ СОБСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР ДАЙСОНА

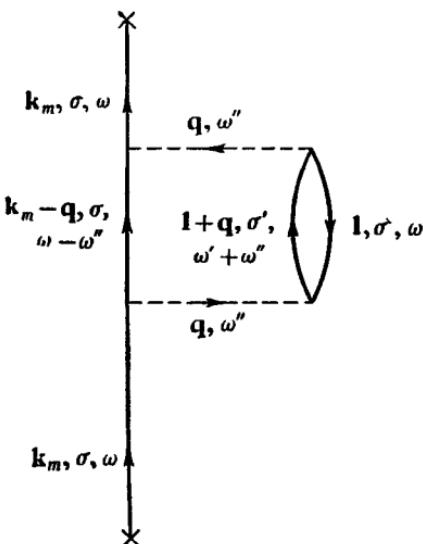
Соотношение (6.18) и соответствующая ему диаграмма на фиг. 106 показывают, как определять вклад в $G(\mathbf{k}, \omega)$ любой конкретной диаграммы. При этом необходимо помнить о сохранении энергии и импульса и о том, что каждая линия соответствует невозмущенной функции Грина. В связи с этим запишем

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{n,\alpha} G_{n\alpha}(\mathbf{k}, \omega) =$$

$$= \begin{array}{c} \uparrow \\ \times \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \cdots \circ \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \square \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \square \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \square \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \cdots \circ \end{array} + \dots, \quad (7.1)$$

где в отличие от (5.2) диаграммы в правой части обозначают вклады в $G(\mathbf{k}, \omega)$.

При вычислении вкладов различных диаграмм мы вскоре обнаруживаем, что можно значительно упростить формальные выражения, если сразу учитывать законы сохранения (1.3.6), которым соответствуют δ-функции в (6.18). Например, если теперь нам придется вычислять вклад $G_{2d}(\mathbf{k}, \omega)$, то можно заменить фиг. 104 на фиг. 107, где значения индексов выбраны так, чтобы автоматически учитывалось сохранение энергии и



Фиг. 107.

импульса. Тем самым особое внимание уделяется передаче импульса и энергии. Далее, для вычисления $G_{2d}(\mathbf{k}, \omega)$ необходимо записать матричные элементы для потенциалов взаимодействия [здесь в обоих случаях $v(\mathbf{q})$], а также различные функции Грина и постоянные множители, после чего произвести суммирование по внутренним переменным. Таким способом снова получаем (6.13).

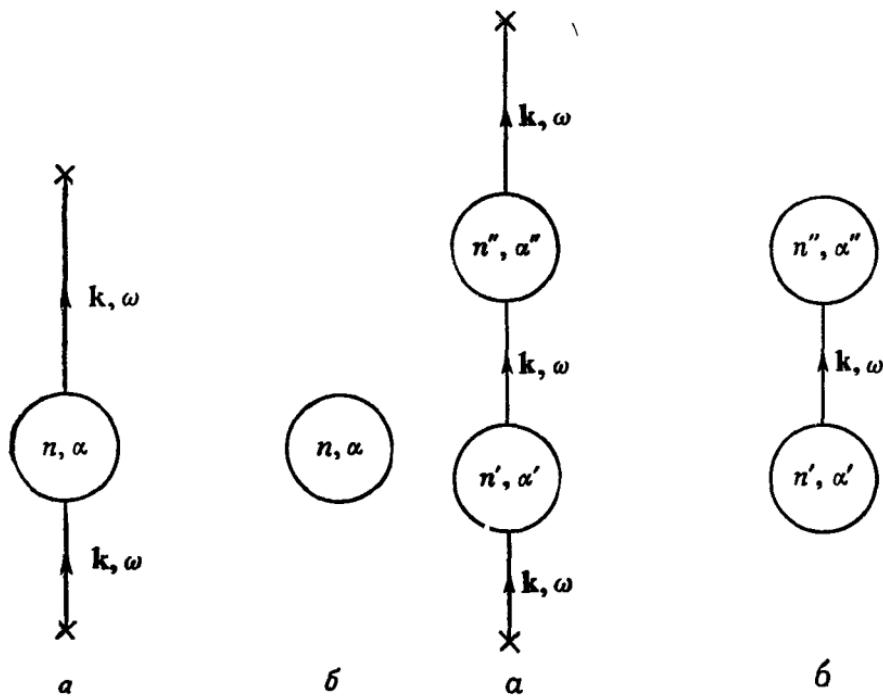
Соотношение (7.1), как мы сейчас покажем, имеет очень простую структуру. Выше мы видели, что вклад нулевого порядка в $G(\mathbf{k}, \omega)$ равен $G_0(\mathbf{k}, \omega)$. Все остальные соответствуют диаграммам типа изображенной на фиг. 108, центральная часть которой включает $n (\geq 1)$ линий взаимодействия. Вклад этой диаграммы описывается соотношением (6.19), поэтому при желании можно записать (7.1) в форме

$$G(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) + G_0^2(\mathbf{k}, \omega) M_R(\mathbf{k}, \omega), \quad (7.2)$$

где M_R — приводимый собствено-энергетический оператор

$$M_R(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{n, \alpha} M_{n\alpha}(\mathbf{k}, \omega). \quad (7.3)$$

Форма записи (7.2) сама по себе не слишком удобна, но она позволяет перейти к рассмотрению собствено-энергетических частей (блок n, α), соответствующих вкладам $M_{n\alpha}$ в (7.3).

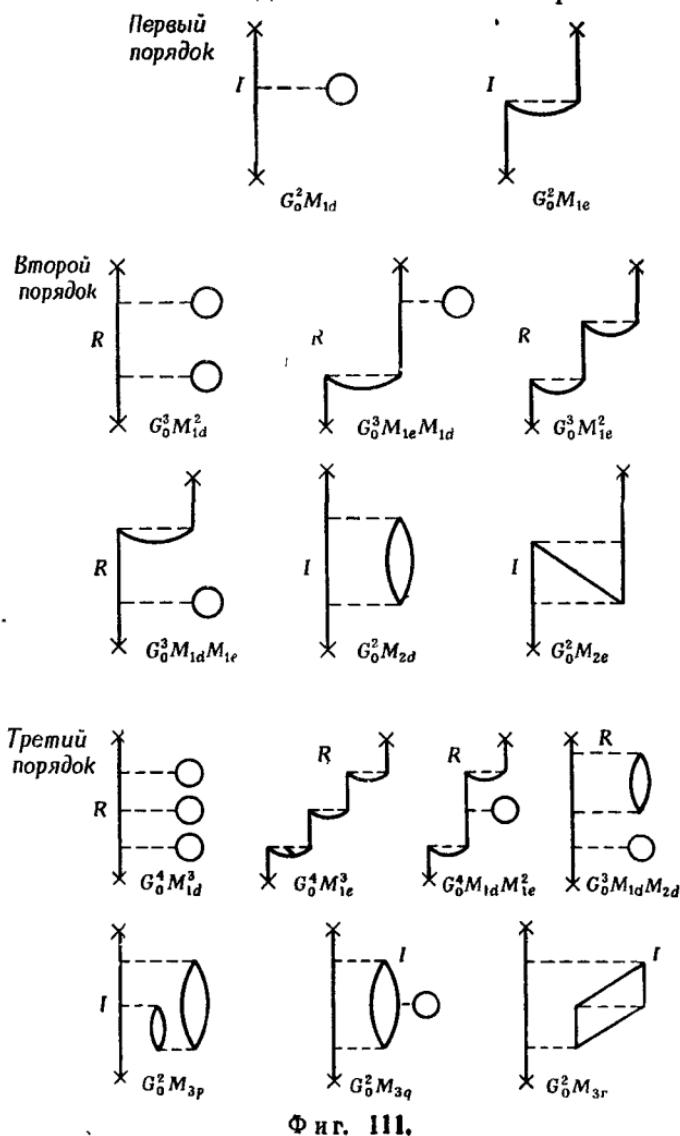


Фиг. 108. а — вклад в G ; б — вклад в M_R . Фиг. 109. а — вклад в G ; б — вклад в M_R .

Ниже при более детальном исследовании этих блоков мы покажем, что можно записать G в форме, удобной как для вычислений, так и для приложений. Начнем анализ с того, что дадим несколько определений.

Диаграмму, изображенную на фиг. 108, либо можно, либо нельзя представить в виде диаграммы на фиг. 109. (У промежуточной линии обязательно будут те же индексы \mathbf{k} и ω , что и у конечной и начальной линий в силу сохранения энергии, спина и импульса в каждой вершине.) Если такое преобразо-

неприводимых собственно-энергетических блоков, соединенных между собой линиями с индексами k и ω . Если фиг. 110 является



просто более сложным эквивалентом фиг. 108, то путем непосредственного обобщения соотношения (7.4) получаем

$$M_{na} = G_0^{l-1} M_{n_1 a_1} \dots M_{n_l a_l} \quad (7.5)$$

Для наглядной иллюстрации этих рассуждений на фиг. 111 изображены все возможные диаграммы первого, второго и не-

сколько диаграмм третьего порядка вместе с их вкладами в $G(\mathbf{k}, \omega)$. Приводимые и неприводимые части отмечены соответственно индексами R и I . Члены второго порядка соответствуют необведенным диаграммам на фиг. 135 (приложение X), где индексы не указаны. Величины M_{1d} , M_{1e} , M_{2d} , M_{2e} уже были определены выше [см. (6.5), (6.8), (6.13), (6.17)]; величины M_{3p} , M_{2q} , M_{3r} определяются соответствующими диаграммами.

Теперь можно вывести очень важное уравнение Дайсона, справедливость которого мы предположили и использовали ранее [см. § 3, соотношение (3.2)]. Начнем с того, что запишем разложение $G(\mathbf{k}, \omega)$ (7.1) и перегруппируем члены, представив его в виде степенного ряда по G_0 . При этом имеем

$$\begin{aligned} G = G_0 + (G_0^2 M_{1d} + G_0^2 M_{1e}) + (G_0^3 M_{1d}^2 + 2G_0^3 M_{1d} M_{1e} + G_0^3 M_{1e}^2 + \\ + G_0^2 M_{2d} + G_0^2 M_{2e}) + (G_0^4 M_{1d}^3 + G_0^4 M_{1e}^3 + \dots) + \dots = \\ = G_0 + G_0^2 (M_{1d} + M_{1e} + M_{2d} + M_{2e} + M_{3p} + \dots) + \\ + G_0^3 (M_{1d} + M_{1e} + M_{2d} + \dots)^2 + \dots \quad (7.6) \end{aligned}$$

Если теперь ввести сумму всех неприводимых собственно-энергетических частей

$$M = M_{1d} + M_{1e} + M_{2d} + M_{2e} + M_{3p} + \dots, \quad (7.7)$$

то (7.6) принимает вид

$$G = G_0 + G_0^2 M + G_0^3 M^2 + \dots = \frac{1}{G_0^{-1} - M}. \quad (7.8)$$

Величина M представляет собой дайсоновскую неприводимую собственно-энергетическую часть (см. § 3). Если воспользоваться соотношением (2.12) и заменить G_0^{-1} на $\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega$, то мы получим фундаментальное выражение (3.2) для функции Грина G . На самом деле наш „вывод“ соотношения (7.6) справедлив только в низшем порядке, но можно легко проделать и более общий вывод, так как общий член соотношения (7.6) имеет вид

$$\begin{aligned} G_0 (M_{1d} + M_{1e} + \dots) G_0 (M_{1d} + M_{1e} + \dots) G_0 \dots \\ \dots G_0 (M_{1d} + M_{1e} + \dots) G_0 = \\ = \sum G_0 M_{n_1 a_1} G_0 M_{n_2 a_2} \dots G_0 M_{n_f a_f} G_0. \quad (7.9) \end{aligned}$$

Если вспомнить результат (7.5), то получаем, что каждый упорядоченный член (7.9) соответствует одному и только одному члену исходного ряда. Тогда, суммируя (7.9) по всем степеням, мы получим для G разложение (7.1).

При применении соотношения (7.8) главной задачей является вычисление M . При этом для определения энергии и времени жизни квазичастиц используются методы, описанные в § 4. На самом деле невозможно точно вычислить M , в связи с чем обычно приходится довольствоваться выделением и вычислением доминирующих членов суммы (7.7). Сила метода функций Грина состоит в том, что применение приближенного значения M в (7.8) равнозначно суммированию бесконечной подпоследовательности членов ряда разложения G . Таким образом мы исправляем первоначальную „ошибку“ разложения функций G в ряд теории возмущений. Кроме того, при частичном суммировании мы не только не усложняем задачу, но значительно упрощаем ее. Проиллюстрируем метод приближенного решения некоторыми примерами.

1. Приближение Хартри

В соответствии с (6.5) запишем

$$M(\mathbf{k}, \omega) \approx M_{1d}(\mathbf{k}, \omega) = - \sum_{l < k_f} \langle \mathbf{kL} | v | \mathbf{kL} \rangle. \quad (7.10)$$

Эта величина действительна и не зависит от ω . Таким образом, применяя (3.11), получаем энергию квазичастицы

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{l < k_f} \langle \mathbf{kL} | v | \mathbf{kL} \rangle, \quad (7.11)$$

тогда как время жизни ее бесконечно.

Мы видим, что приближение Хартри соответствует использованию для G приближенного выражения

$$\frac{1}{G_0^{-1} - M_{1d}} = G_0 + G_0^2 M_{1d} + G_0^3 M_{1d}^2 + \dots = \underbrace{\mathbf{x}}_{\times} + \underbrace{\mathbf{x} \cdots \mathbf{o}}_{\times} + \underbrace{\mathbf{x} \cdots \mathbf{o}}_{\times} + \dots \quad (7.12)$$

2. Приближение Хартри — Фока

В приближении Хартри — Фока в соответствии с (6.5) и (6.8) имеем

$$\begin{aligned} M(\mathbf{k}, \omega) &\approx M_{1d}(\mathbf{k}, \omega) + M_{1e}(\mathbf{k}, \omega) = \\ &= - \sum_{l < k_f} \langle \mathbf{kL} | v | \mathbf{kL} \rangle + \sum_{l < k_f} \langle L \mathbf{k} | v | \mathbf{kL} \rangle. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Здесь также величина $M(\mathbf{k}, \omega)$ действительна и не зависит от ω , так что решение уравнений (3.11) и (3.12) становится

тривиальным. Для энергии квазичастиц получаем

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{l < k_f} \langle \mathbf{k}L | v | \mathbf{k}L \rangle - \sum_{l < k_f} \langle L\mathbf{k} | v | L\mathbf{k} \rangle; \quad (7.14)$$

затухание отсутствует.

Метод Хартри — Фока соответствует использованию приближенного пропагатора

$$\frac{1}{G_0^{-1} - (M_{1d} + M_{1e})} = G_0 + G_0^2(M_{1d} + M_{1e}) + G_0^3(M_{1d} + M_{1e})^2 + \dots =$$

$$= \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \circ + \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \circ + \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \circ + \dots, \quad (7.15)$$

что означает учет всех возможных комбинаций прямых и обменных взаимодействий выделенной частицы с остальными частицами системы в течение всего времени ее распространения.

3. Приближения более высокого порядка

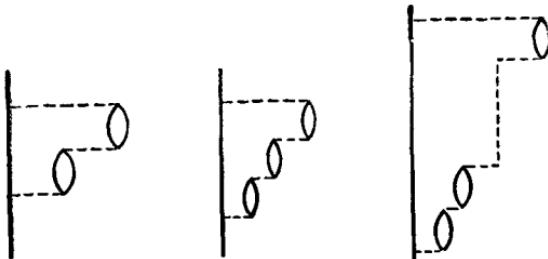
В случае систем со слабым взаимодействием, матричные элементы которого конечны, способ обобщения приближения Хартри — Фока очевиден. Мы просто вводим в выражение (7.13) для собственно-энергетического оператора члены, квадратичные по взаимодействию

$$M(\mathbf{k}, \omega) \approx M_{1d} + M_{1e} + M_{2d} + M_{2e}. \quad (7.16)$$

Последние два члена, определяемые соотношениями (6.13) и (6.17), явно зависят от ω и, кроме того, имеют мнимые части. Следовательно, в этом случае решение уравнений (3.11) и (3.12) становится нетривиальным. Подробное исследование этого вопроса, а также более общей задачи о разреженной ферми-системе с короткодействующим взаимодействием читатель может найти в работах Галицкого [71], Клейна [114] и Пайнса [163].

В случае кулоновского взаимодействия возникает дополнительная трудность, связанная, как обычно, с особой природой потенциала. Из (6.13) мы видим, что при $v(\mathbf{q}) \sim q^{-2}$ член M_{2d} расходится. Очевидно, что это не что иное, как еще один пример „накопления“ множителей $v(\mathbf{q})$, рассмотренного в гл. 5. Для устранения такой расходимости необходимо просуммировать диаграммы определенного типа всех порядков. В приближении

случайных фаз это делается путем добавления к правой части (7.16) всевозможных кольцевых включений типа изображенных на фиг. 112. Более того, можно доказать, что таким способом мы получаем наиболее существенные члены для высоких плотностей. В итоге мы снова приходим к основным результатам



Фиг 112

гл. 5, так что здесь не будем вдаваться в детали этой проблемы, обсуждение которых читатель может найти в работах Дюбуа [56] (численные поправки к работе Дюбуа см. в работе [155]) и Куинна и Феррелла [167].

§ 8. КОЛЛЕКТИВНОЕ ДВИЖЕНИЕ. ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Выше уже было показано (см. гл. 5 и 8), что в идеальной системе при включении взаимодействия могут возникнуть новые коллективные возбуждения, которые обнаруживаются по взаимодействию с пробными частицами, вводимыми в систему извне (например, заряженными частицами при обнаружении плазмонов или с нейтронами при обнаружении фононов). Переходим теперь к описанию такого коллективного движения. Формально это сводится к исследованию особой формы двухчастичных функций Грина, а применяемые методы аналогичны использованным ранее. Мы будем идти тем же путем, что и при рассмотрении одночастичного пропагатора, но из-за сходства используемого формализма с рассмотренным ранее изложение будет более сжатым.

При исследовании квазичастиц в § 3 задача была сформулирована следующим образом: в момент времени t_1 в систему вводится голая частица (или дырка) с индексом k ; необходимо найти амплитуду вероятности $G(k, t_2 - t_1)$ обнаружить ее в момент времени t_2 . При некоторых определенных условиях, а именно в том случае, когда вид энергии возбуждения как функции от k выбран соответствующим образом, функция G , как было пока-

зано, сравнительно медленно затухает со временем. Таким способом была определена энергия квазичастиц.

В настоящей задаче используется тот же метод. Возбудим в системе взаимодействующих N частиц в момент времени t_1 флюктуацию плотности с волновым индексом \mathbf{k} , а затем определим вероятность обнаружить ее в момент t_2 . Соответствующая амплитуда равна

$$F(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = i \langle \Psi_n(0) | T \{ \rho_{kt_1} \rho_{kt_1}^+ \} | \Psi_n(0) \rangle, \quad (8.1)$$

где

$$\rho_{kt} = e^{iHt} \rho_{\mathbf{k}} e^{-iHt}. \quad (8.2)$$

С учетом (1.3.4) и классического выражения (8.2.68) имеем

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{q, \sigma} a_{k+q\sigma}^\dagger a_{q\sigma}. \quad (8.3)$$

Отметим, что, как обычно в теории флюктуаций плотности, здесь индекс \mathbf{k} означает только импульс, а не импульс и спин, как в теории функций Грина.

Для наших конкретных целей удобно воспользоваться соотношением (8.3) и записать (8.2) и соответствующую комплексно сопряженную величину в виде

$$\rho_{kt} = \sum_{q, \sigma} a_{k+q\sigma t}^\dagger a_{q\sigma t}; \quad \rho_{kt}^+ = (\rho_{kt})^+ = \rho_{-kt}. \quad (8.4)$$

С помощью последнего из этих соотношений представим (8.1) в следующей форме:

$$F(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \sum_{\substack{q_1 \sigma_1 \\ q_2 \sigma_2 \\ q_3 \sigma_3}} F_{q_1 \sigma_1}(k, t_2 - t_1), \quad (8.5)$$

где

$$F_{q_1 \sigma_1}(k, t_2 - t_1) = i \langle \Psi_n(0) | T (a_{k+q_2 \sigma_2 t_2}^\dagger a_{q_2 \sigma_2 t_2} a_{q_3 \sigma_3 t_3}^\dagger a_{q_3 \sigma_3 t_3} a_{k+q_1 \sigma_1 t_1}) | \Psi_n(0) \rangle. \quad (8.6)$$

Нужно отметить, что в (8.6) оператор T определяется по его действию на операторы a и a^\dagger . Поэтому для интерпретации соотношения (8.1) удобнее воспользоваться формой (8.6). При этом благодаря биквадратной форме оператора в круглых скобках получаем

$$T(\rho_{kt_2} \rho_{kt_1}^+) = \begin{cases} \rho_{kt_1} \rho_{kt_1}^+, & t_2 > t_1, \\ \rho_{kt_1}^+ \rho_{kt_2}, & t_1 > t_2, \end{cases} \quad (8.7)$$

В соответствии с § 3 нас интересует, какой выбор энергий возбуждений приведет только к слабому затуханию

амплитуды (8.5). Ответ на этот вопрос опять-таки определяется полюсами фурье-образа амплитуды (8.5) в ω -пространстве

$$F(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\substack{\mathbf{q}_1 \sigma_1 \\ \mathbf{q}_2 \sigma_2}} F_{\mathbf{q}_1 \sigma_1}(\mathbf{k}, \omega), \quad (8.8)$$

где

$$F_{\mathbf{q}_1 \sigma_1}(\mathbf{k}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F_{\mathbf{q}_1 \sigma_1}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega t}. \quad (8.9)$$

Таким образом, мы в конце концов приходим к диаграммному исследованию выражения (8.6), представляющего собой частный случай двухчастичной функции Грина.

После этих предварительных замечаний и определений перейдем к изложению теории.

§ 9. СПЕКТРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И КОЛЛЕКТИВНЫЕ МОДЫ

Изложение можно было бы проводить совершенно тем же путем, как в § 3, начав с вычисления амплитуды $F(\mathbf{k}, \omega)$, определяемой ниже соотношением (9.9), которое является аналогом соотношения (3.2). Однако в этом параграфе мы воспользуемся методом спектрального представления, так как здесь он оказывается более удобным.

Введем набор промежуточных состояний

$$H|r\rangle = E_r|r\rangle, \quad \langle r|r\rangle = 1, \quad (9.1)$$

в котором основное состояние снова определяется соотношением (2.4). Тогда из (8.1), (8.2) и (8.7) получаем соотношения

$$F(\mathbf{k}, t) = \begin{cases} i \sum_r |\langle \Psi_n(0) | \rho_{\mathbf{k}} | r \rangle|^2 e^{-i(E_r - E)t}, & t > 0, \\ i \sum_r |\langle \Psi_n(0) | \rho_{\mathbf{k}}^+ | r \rangle|^2 e^{i(E_r - E)t}, & t < 0, \end{cases} \quad (9.2)$$

первое из которых определяет амплитуду вероятности обнаружить в системе спустя время t моду, возникшую в момент времени $t = 0$, а второе — амплитуду вероятности того, что мода, обнаруженная в момент $t = 0$, существовала на время t ранее этого момента. В силу такой интерпретации $F(\mathbf{k}, t) = F(\mathbf{k}, -t)$, и, следовательно,

$$\langle \Psi_n(0) | \rho_{\mathbf{k}} | r \rangle = \langle \Psi_n(0) | \rho_{\mathbf{k}}^+ | r \rangle. \quad (9.3)$$

Кроме того, с учетом условия $\rho_{\mathbf{k}}^+ = \rho_{-\mathbf{k}}$ [см. (8.4)] из (9.3) следует, что изменение направления распространения волны не меняет соответствующего матричного элемента.

Теперь введем функцию (спектральную плотность состояний)

$$S(k, \omega) = \sum_r |\langle \Psi_n(0) | \rho_k | r \rangle|^2 \delta[\omega - (E_r - E)], \quad (9.4)$$

с помощью которой получаем

$$F(k, \omega) = \int_0^\infty d\omega' S(k, \omega') \left(\frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' - i\eta} \right). \quad (9.5)$$

Можно непосредственно убедиться в том, что (9.5) и (9.2) являются фурье-образами друг друга.

Если бы мы могли записать спектральную плотность состояний [см. гл. 8, особенно соотношение (8.3.42)] в виде

$$S(k, \omega) = S(k) \delta(\omega - \omega_k), \quad (9.6)$$

где частота ω_k действительна ($\omega_k \equiv \epsilon_k$ при $\hbar = 1$), то соотношение (9.5) приняло бы вид

$$F(k, \omega) = S(k) \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta} - \frac{1}{\omega + \epsilon_k - i\eta} \right), \quad F(k, t) = iS(k) e^{i\omega_k t}. \quad (9.7)$$

Таким образом, функция $F(k, \omega)$ имеет полюс при $\omega = \omega_k$; следовательно, она описывает незатухающие колебания с частотой ω_k . В общем случае, конечно, такая предельная ситуация никогда не реализуется точно, но если при некоторых значениях k интегральное выражение в (9.5) имеет полюс $\xi_k = \epsilon_k - i\Gamma_k$ с $0 < \Gamma_k \ll \epsilon_k$, то $F(k, t)$ будет описывать колебания с энергией возбуждения ϵ_k и временем жизни $1/\Gamma_k$. Это соответствует наличию у функции $S(k, \omega)$ ярко выраженного пика вблизи точки $\omega = \epsilon_k$, имеющего полуширину Γ_k . Таким образом, формально наша задача сводится к отысканию полюсов функции $F(k, \omega)$.

На данной стадии исследования удобно дать несколько определений, а уже потом перейти к диаграммному анализу функции $F(k, t)$ на базе соотношений (8.5) и (8.6). Введем величину $\epsilon(k, \omega)$ (см. гл. 5), назначение которой выяснится позже:

$$1 - \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} = v_k F(k, \omega), \quad (9.8)$$

и будем называть ее диэлектрической функцией (проницаемостью). Кроме того, подобно тому, как мы предугадали дайсоновскую форму функции G [см. (3.2)], установим одну из возможных форм функции F , которой будем пользоваться при

вычислениях:

$$F(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Q(\mathbf{k}, \omega)}{1 + v_{\mathbf{k}} Q(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (9.9)$$

где функция Q носит название неприводимого, или собственного поляризационного оператора и является аналогом дайсоновского массового оператора (собственно-энергетической части) M теории одночастичного пропагатора. Сравнивая (9.8) и (9.9), получаем

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + v_{\mathbf{k}} Q(\mathbf{k}, \omega). \quad (9.10)$$

Полюсы F теперь можно получить из уравнения

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (9.11)$$

Как и в предыдущем случае, при любом конкретном применении все расчеты сводятся к некоторому приближенному вычислению Q . Дальнейшая процедура очевидна из рассмотрения, проведенного в § 3.

§ 10. ТЕОРЕМА РАЗЛОЖЕНИЯ ПО СВЯЗНЫМ ДИАГРАММАМ ДЛЯ ПАР ЧАСТИЦА — ДЫРКА

В настоящем параграфе мы будем непосредственно следовать методам, использованным в § 4 и 5 для одночастичной функции Грина. Сначала вычислим (8.6), затем перейдем к фурье-образу, с помощью которого найдем из (8.8) функцию $F(\mathbf{k}, \omega)$.

Возвращаясь теперь к (8.6), запишем в явном виде операторы $a_{k\ell}$, используя соотношения (4.5) с учетом правила умножения (4.6), а также соотношения (4.13), показывающие, что операторы $a_k(t)$ и U коммутируют между собой. В результате получаем

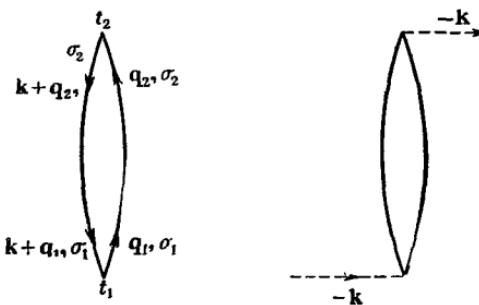
$$\begin{aligned} F_{q_1\sigma_1 \atop q_2\sigma_2}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) &= \\ &= \frac{i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt'_n \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \langle g | T \{ V(t'_1) \dots V(t'_n) \times } \\ &\quad \times a_{k+q_2\sigma_2}^{\dagger}(t_2) a_{q_2\sigma_2}(t_2) a_{q_1\sigma_1}^{\dagger}(t_1) a_{k+q_1\sigma_1}(t_1) \} | g \rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt'_n \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \langle g | T \{ V(t'_1) \dots V(t'_n) \} | g \rangle}. \quad (10.1) \end{aligned}$$

С помощью методов, подобных изложенному в приложении X, можно провести диаграммное исследование числителя

соотношения (10.1). Член нулевого порядка равен умноженному на i выражению

$$\begin{aligned} & \langle g | T \{ a_{k+q_2\sigma_2}^\dagger(t_2) a_{q_2\sigma_2}(t_2) a_{q_1\sigma_1}^\dagger(t_1) a_{k+q_1\sigma_1}(t_1) \} | g \rangle = \\ & = \{ a_{k+q_2\sigma_2}^\dagger(t_2) a_{q_2\sigma_2}(t_2) a_{q_1\sigma_1}^\dagger(t_1) a_{k+q_1\sigma_1}(t_1) + \\ & + a_{k+q_2\sigma_2}^\dagger(t_2) a_{q_2\sigma_2}(t_2) a_{q_1\sigma_1}^\dagger(t_1) a_{k+q_1\sigma_1}(t_1) \} = \\ & = \delta_{q_1\sigma_1, q_2\sigma_2} G_0(k+q_1, t_1-t_2) G_0(q_1, t_2-t_1), \end{aligned} \quad (10.2)$$

в котором второй член со свертками равен нулю, так как $\mathbf{k} \neq 0$. Диаграмма для первого члена показана на фиг. 113. Вообще говоря, такой диаграммы вполне достаточно, но если



Ф и г. 113.

мы хотим подчеркнуть, что для рождения пары частица—дырка необходимо было сообщить системе импульс, который отбирается у нее при аннигиляции этой пары, то можно добавить дополнительные линии, как показано на диаграмме. Эти линии не обязательно образуют вершины, хотя одним из способов передачи и последующего поглощения импульса может, очевидно, быть взаимодействие с другой частицей.

Так же как и в приложении X, пересечения линий при t_1 и t_2 , которые мы будем называть внешними вершинами, могут перемещаться, может изменяться даже временное упорядочение, но топологическая структура диаграммы сохраняется. Член нулевого порядка для двухчастичной функции Грина общего вида состоит из двух отдельных линий. Однако в данном конкретном случае концы линий соединены в вершину, поскольку мы рассматриваем рождение частицы q_1, σ_1 и дырки $k+q_1, \sigma_1$ и их последующую аннигиляцию.

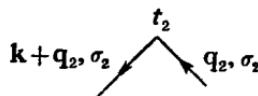
Разработанные ранее правила построения диаграмм можно использовать здесь без изменения. Даже правило, связанное

с числом замкнутых петель, остается неизменным. Действительно, введение внешних вершин, замыкающих открытые концы двухчастичной функции, дает лишнюю петлю в диаграмме и тем самым лишний знак минус, который компенсируется, когда мы переписываем форму $a_{k+q_1\sigma_1}^\dagger(t_2) a_{q_2\sigma_2}(t_2) a_{q_1\sigma_1}^\dagger(t_1) \times \times a_{k+q_1\sigma_1}(t_1)$ в виде стандартного произведения четырех операторов $a^\dagger a^\dagger aa$, которое всегда входит во взаимодействие $V(t)$. Следовательно, непосредственно из диаграммы на фиг. 113 вытекает, что (10.2) можно записать в виде

$$(-1)^1 \{ -i\delta_{k+q_1\sigma_1, k+q_2\sigma_2} G_0(k + q_1, t_1 - t_2) \} \{ -i\delta_{q_1\sigma_1, q_2\sigma_2} G_0(q_1, t_2 - t_1) \}.$$

1. Обобщенные пары частица — дырка

Продолжим исследование числителя выражения (10.1) в более высоких порядках по взаимодействию. Чтобы получить все диаграммы n -го порядка, изобразим на фиг. 114 одну

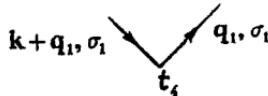


$2n-1$ ----- $2n$

$2n-3$ ----- $2n-2$

3 ----- 4

1 ----- 2



Фиг. 114.

внешнюю вершину при t_1 , что указывает на рождение пары частица — дырка, а другую — при t_2 , что соответствует уничтожению такой пары. Затем нанесем помеченные цифровыми индексами линии взаимодействия, после чего всеми возможными способами проведем линии частиц и дырок. Любая такая диаграмма представляет один из n -частичных вкладов в разложении числителя (10.1).

При этом обнаруживается существование двух типов диаграмм: связных и несвязных, определение которых носит чисто геометрический характер. Как и ранее, это приводит к факто-ризации числителя, причем один из сомножителей сокращается с знаменателем. Оставшийся сомножитель состоит только из связных диаграмм, что позволяет нам перейти к безиндексным диаграммам (см. по этому вопросу приложение X и соответствующие замечания о безиндексных диаграммах в § 5). Таким образом, мы приходим к формуле

$$\begin{aligned}
 F_{q_1\sigma_1}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = & \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^{n-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_{(2n-1)2n} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_{12} \times \\
 & \times \sum_{\substack{KL \\ KLMN \\ PQRS \\ \dots \\ XYZT}} \langle KL | v | NM \rangle \langle PQ | v | SR \rangle \dots \langle XY | v | TZ \rangle \langle g | T \{ a_K^\dagger(t_{12}) \times \\
 & \times a_L^\dagger(t_{12}) \dots a_T^\dagger(t_{(2n-1)2n}) a_{\mathbf{k}+q_2\sigma_2}^\dagger(t_2) a_{q_2\sigma_2}(t_2) a_{q_1\sigma_1}^\dagger(t_1) a_{\mathbf{k}+q_1\sigma_1}(t_1) \} | g \rangle_{\text{св}}, \tag{10.3}
 \end{aligned}$$

где индекс „св“ указывает, что нужно учитывать только различные связные безиндексные диаграммы. Соотношение (10.3) представляет собой теорему разложения по связным диаграммам и является аналогом разложения (5.1) в теории одночастичных функций Грина.

§ 11. ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ ПРОПАГАТОРА ПАРЫ ЧАСТИЦА – ДЫРКА

Теперь займемся исследованием различных связных компонент члена

$$\begin{aligned}
 \langle g | T \{ a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) \dots a_T^\dagger(t_{(2n-1)2n}) a_{\mathbf{k}+q_2\sigma_2}^\dagger(t_2) \times \\
 \times a_{q_2\sigma_2}(t_2) a_{q_1\sigma_1}^\dagger(t_1) a_{\mathbf{k}+q_1\sigma_1}(t_1) \} | g \rangle. \tag{11.1}
 \end{aligned}$$

а) Нулевой порядок. Мы уже рассмотрели этот случай. Соответствующая диаграмма изображена на фиг. 113, а математическое выражение совпадает с (10.2).

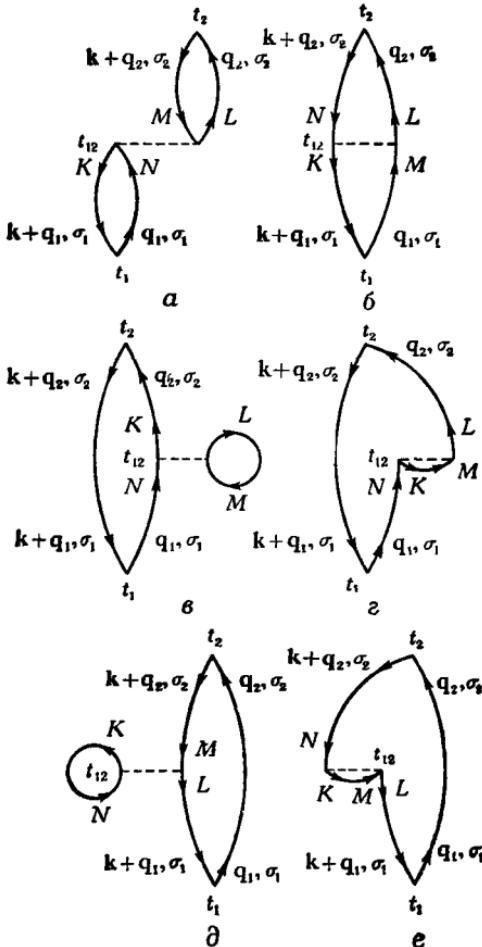
б) Первый порядок. Шесть различных диаграмм, дающих вклад первого порядка, изображены на фиг. 115. Для записи соответствующих математических выражений можно использовать разработанные нами правила. Так, например, вклад диаграммы на фиг. 115, *a* равен

$$\begin{aligned}
 (-1)^2 (-i)^4 \delta_{K\mathbf{k}+q_1\sigma_1} \delta_{Lq_2\sigma_2} \delta_{M\mathbf{k}+q_2\sigma_2} \delta_{Nq_1\sigma_1} G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, t_1 - t_{12}) \times \\
 \times G_0(\mathbf{q}_2, t_2 - t_{12}) G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, t_{12} - t_2) G_0(\mathbf{q}_1, t_{12} - t_1), \tag{11.2}
 \end{aligned}$$

а для диаграммы на фиг. 115, б имеет вид

$$(-1)^2 (-i)^4 \delta_{Kk+q_1\sigma_1} \delta_{Lq_2\sigma_2} \delta_{Mq_1\sigma_1} \delta_{Nk+q_2\sigma_2} G_0(k+q_1, t_1 - t_{12}) \times \\ \times G_0(q_2, t_2 - t_{12}) G_0(q_1, t_{12} - t_1) G_0(k+q_2, t_{12} - t_2). \quad (11.3)$$

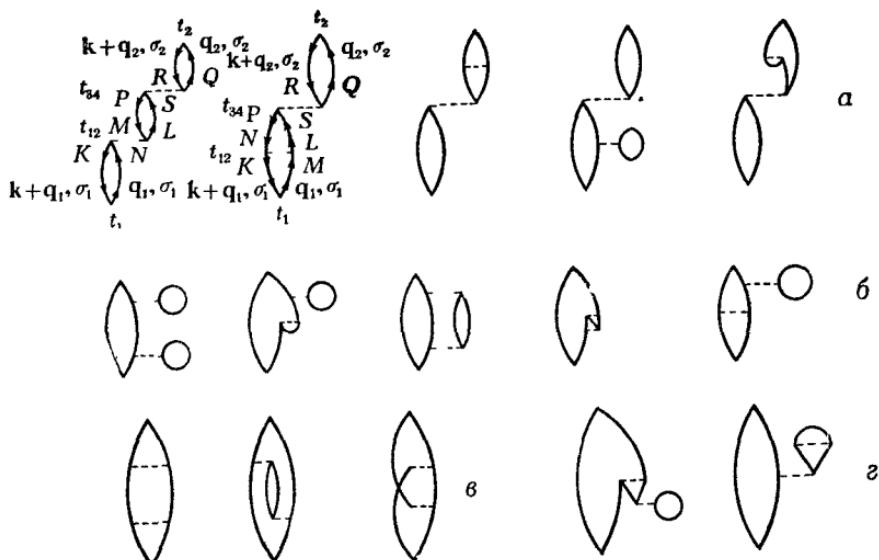
Не представляет труда записать выражения, соответствующие остальным диаграммам.



Фиг. 115. Диаграммы первого порядка.

в) Второй порядок. В этом порядке существует очень много диаграмм, часть которых приведена на фиг. 116. Каждая диаграмма группы а состоит из диаграмм низшего порядка (см. фиг. 113, 114), внешние вершины которых соединены линиями взаимодействия. Диаграммы этой группы относятся к классу

приводимых диаграмм, определение которого будет дано ниже. На первых двух диаграммах указаны индексы, так как ниже нам понадобится явно записать их вклад. Все остальные (не-приводимые) диаграммы для удобства можно также разделить на группы. Группа *б* состоит из диаграмм первого и второго порядков с соответствующим числом собственно-энергетических



Фиг. 116. Некоторые диаграммы второго порядка.

включений. Наконец, существует группа диаграмм, дающих ненулевой вклад, но имеющих совершенно особую структуру, которую невозможно свести к комбинации диаграмм низших порядков. Некоторые из них приведены в группе *в* на фиг. 116. Как и в ранее рассмотренном случае (напомним, например, обсуждение фиг. 13, *г* и фиг. 16), здесь существуют диаграммы, вклад которых равен нулю. Примеры такого рода приведены на фиг. 116, *г*.

Можно снова использовать разработанные выше правила для вычисления вкладов различных диаграмм. Так, например, первая диаграмма на фиг. 116 дает вклад

$$\begin{aligned}
 & (-1)^3 (-i)^6 \delta_{Kk+q_1\sigma_1} \delta_{LS} \delta_{MP} \delta_{Nq_1\sigma_1} \delta_{Qq_2\sigma_2} \delta_{Rk+q_2\sigma_2} \times \\
 & \times G_0(k + q_1, t_1 - t_{12}) G_0(L, t_{34} - t_{12}) G_0(M, t_{12} - t_{34}) \times \\
 & \times G_0(q_1, t_{12} - t_1) G_0(q_2, t_2 - t_{34}) G_0(k + q_2, t_{34} - t_2), \quad (11.4)
 \end{aligned}$$

а вторая

$$(-1)^2 (-i)^6 \delta_{Kk+q_1\sigma_1} \delta_{LS} \delta_{Mq_1\sigma_1} \delta_{NP} \delta_{Qq_2\sigma_2} \delta_{Rk+q_2\sigma_2} \times \\ \times G_0(k + q_1, t_1 - t_{12}) G_0(L, t_{34} - t_{12}) G_0(q_1, t_{12} - t_1) \times \\ \times G_0(N, t_{12} - t_{34}) G_0(q_2, t_2 - t_{34}) G_0(k + q_2, t_{34} - t_2). \quad (11.5)$$

Таким же образом мы исследуем все члены ряда (10.3). Подобно тому, как мы записали (5.1) в виде (5.2), теперь можно записать этот ряд в следующей форме:

$$F_{q_1\sigma_1 \atop q_2\sigma_2}(k, t_2 - t_1) = \\ = \left(\text{---} \right) + \left\{ \left(\text{---}^0 \right) + \left(\text{---} \right) + \left(\text{---} \right) \dots \right\} + \left(\text{---} \right) + \left(\text{---} \right) + \dots + \\ + \left\{ \left(\text{---}^0 \right) + \left(\text{---}^0 \right) + \dots \right\} + \dots \quad (11.6)$$

§ 12. ПОЛЮСЫ ПРОПАГАТОРА И КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Напомним, что наибольший интерес для нас представляют полюсы функции $F(k, \omega)$. В связи с этим займемся вычислением отдельных членов разложения (8.8) этой функции путем фурье-преобразования соотношения (10.3). Как обычно, начнем с простейшего случая.

a) Нулевой порядок. Вклад члена нулевого порядка в (10.3) определяется соотношением (10.2), т. е. равен

$$F_{q_1\sigma_1 \atop q_2\sigma_2}^{(0)}(k, t_2 - t_1) = i\delta_{q_1\sigma_1, q_2\sigma_2} G_0(k + q_1, t_1 - t_2) G_0(q_1, t_2 - t_1). \quad (12.1)$$

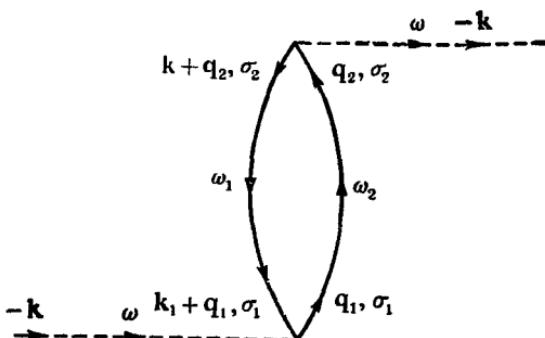
Если с помощью (2.10) перейти к фурье-образам функций G_0 и преобразовать F от t -к ω -пространству, то получим

$$F_{q_1\sigma_1 \atop q_2\sigma_2}^{(0)}(k, \omega) = i\delta_{q_1\sigma_1, q_2\sigma_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} G_0(k + q_1, \omega_1) \times \\ \times G_0(q_1, \omega_2) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega_2 - \omega_1 - \omega)t} = \\ = i\delta_{q_1\sigma_1, q_2\sigma_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} G_0(k + q_1, \omega_1) G_0(q_1, \omega_2) 2\pi\delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega). \quad (12.2)$$

Производя интегрирование по ω_2 , находим

$$F_{q_1\sigma_1 q_2\sigma_2}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = i\delta_{q_1\sigma_1 q_2\sigma_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \omega_1) G_0(\mathbf{q}_1, \omega + \omega_1). \quad (12.3)$$

Этот интеграл был уже вычислен [см. соотношение (6.12)]. В соответствии с (8.8) для вычисления вклада нулевого порядка в $F(\mathbf{k}, \omega)$ нужно просуммировать выражение (12.3) по



Фиг. 117.

$q_1, \sigma_1, q_2, \sigma_2$. Таким образом, мы находим, что этот вклад определяется соотношением (6.15). Появление одной и той же функции $F^{(0)}$ в двух различных случаях, конечно, не случайно. В том и другом случае она возникает за счет одинаковых „петлевых диаграмм“ [см. замечание после (6.15)].

Как и в теории одночастичного пропагатора, мы, очевидно, приходим к выводу, что каждая одночастичная линия несет определенную энергию ω_i . Другой способ изображения диаграмм, иллюстрируемый на фиг. 113, удобен в тех случаях, когда нужно подчеркнуть сохранение импульса и энергии. Так, диаграмма на фиг. 117 отображает законы сохранения, аналитически описываемые соотношением (12.2).

б) *Первый порядок.* Как мы видели (см. фиг. 115), в первом порядке нужно исследовать шесть диаграмм. Ограничимся вычислением только диаграммы на фиг. 115, а; остальные можно исследовать подобным образом.

Диаграмма а дает вклад первого порядка в разложение Вика для матричного элемента (11.1). Он равен (11.2). Подставляя это выражение в (10.3) и совершая преобразование, подобное сделанному при переходе от (12.1) к (12.2), получаем

вклад в $F(\mathbf{k}, \omega)$, равный

$$F_{\mathbf{q}_1\sigma_1}^{(1a)}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_{12} \int_{-\infty}^{\infty} d(t_2 - t_1) \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle (-1)^2 (-t)^4 \times \\ \times \delta_{K\mathbf{k} + \mathbf{q}_1\sigma_1} \delta_{L\mathbf{q}_2\sigma_2} \delta_{M\mathbf{k} + \mathbf{q}_2\sigma_2} \delta_{N\mathbf{q}_1\sigma_1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} \times \\ \times G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \omega_1) G_0(\mathbf{q}_2, \omega_2) G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \omega_3) G_0(\mathbf{q}_1, \omega_4) e^{-i\omega_1(t_1 - t_{12})} \times \\ \times e^{-i\omega_2(t_2 - t_{12})} e^{-i\omega_3(t_{12} - t_2)} e^{-i\omega_4(t_{12} - t_1)} e^{i\omega(t_2 - t_1)}. \quad (12.4)$$

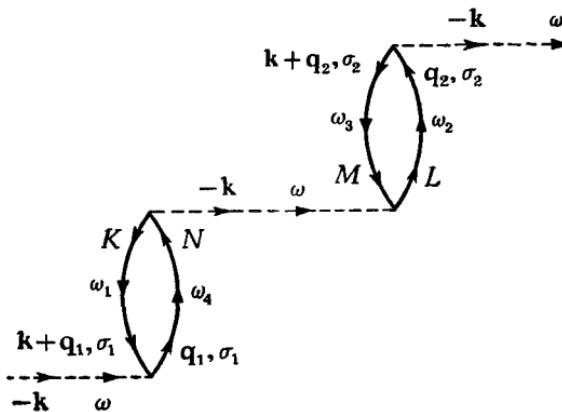
Аналогичное выражение мы получили ранее [см. (6.2)]. Интегрирование по t_{12} приводит к множителю, отвечающему сохранению энергии

$$2\pi\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4),$$

а интегрирование по $t_2 - t_1$ дает

$$2\pi\delta(\omega_2 - \omega_3 + \omega) \text{ или } 2\pi\delta(\omega_1 - \omega_4 + \omega)$$

в зависимости от того, в каком порядке проводилось интегрирование. Соответствующая диаграмма (фиг. 118) показывает,



Фиг. 118.

что для рождения пары частица — дырка требуется некоторый импульс $-k$ и энергия ω . Эта пара распространяется и аннигилирует, рождая следующую пару, причем в таком процессе импульс и энергия сохраняются. Наконец, вторая пара также распространяется и аннигилирует, отдавая импульс $-k$ и энергию ω , первоначально сообщенные системе.

Соотношение (12.4) можно теперь факторизовать следующим образом:

$$\begin{aligned} F_{q_1 \sigma_1}^{(1a)}(k, \omega) = & \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} \{ \delta_{Kk+q_1 \sigma_1} \delta_{Nq_1 \sigma_1} \times \\ & \times G_0(k + q_1, \omega_1) G_0(q_1, \omega_1) 2\pi \delta(\omega_1 - \omega_4 + \omega) \} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} \times \\ & \times \{ \delta_{Lq_2 \sigma_2} \delta_{Mk+q_2 \sigma_2} G_0(q_2, \omega_2) G_0(k + q_2, \omega_3) 2\pi \delta(\omega_2 - \omega_3 - \omega) \}. \end{aligned} \quad (12.5)$$

Теперь с помощью (12.2) и (12.5) получаем

$$F_{q_1 \sigma_1}^{(1a)}(k, \omega) = -v_k F_{q_1 \sigma_1}^{(0)}(k, \omega) F_{q_2 \sigma_2}^{(0)}(k, \omega). \quad (12.6)$$

Суммируя это выражение по всем \mathbf{q} и σ , находим, что полный вклад диаграммы в $F(k, \omega)$ равен

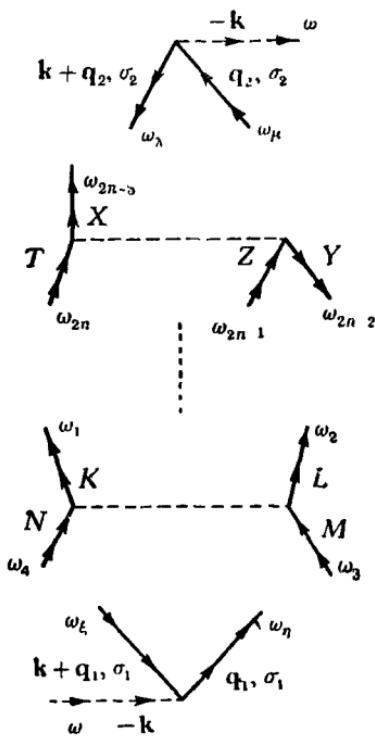
$$F^{(1a)}(k, \omega) = -v_k \{ F^{(0)}(k, \omega) \}^2. \quad (12.7)$$

в) n-й порядок. Мы видим, что в целом метод вычислений очень близок к методу вычисления вкладов в одночастичный пропагатор. В § 10 было показано, как строятся соответствующие временные диаграммы в импульсном представлении. Полученные при этом правила легко применить и к случаю энергетических диаграмм; для этого каждой одночастичной линии необходимо приписать энергетический индекс ω_i , как показано на фиг. 119. Нетрудно получить вклад этих диаграмм в $F(k, \omega)$. Так, например, диаграмма n -го порядка со структурой α , изображенной на фиг. 119, дает вклад

$$\begin{aligned} F_{q_1 \sigma_1}^{(na)}(k, \omega) = & i^{n-1} (-1)^l \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle \dots \langle XY | v | TZ \rangle \delta_{K*} \dots \delta_{T*} \times \\ & \times \dot{X} \dot{Y} \dot{Z} \dot{T} \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{(2\pi)^{2n}} \frac{d\omega_{2n}}{(2\pi)^{2n}} G_0(K, \omega_1) G_0(L, \omega_2) \dots G_0(T, \omega_{2n}) \times \\ & \times 2\pi \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) 2\pi \dots 2\pi \delta(\omega_{2n-3} + \omega_{2n-2} - \omega_{2n-1} - \omega_{2n}) \times \\ & \times 2\pi \delta(\omega + \omega_\lambda - \omega_\mu), \end{aligned} \quad (12.8)$$

где, как и ранее, из-за линейной зависимости аргументов одна из дираковских δ -функций можно заменить на $\delta(\omega_\xi - \omega_\eta + \omega)$, а δ_{K*} и т. д. суть δ -функции для соответствующих состояний K , $*$ и т. д.

Это выражение можно сравнить с соответствующей формулой (6.18) теории одночастичного пропагатора. Как и в том случае [см. фиг. 107 и соотношение (6.13)], здесь нетрудно найти наиболее экономичный способ расстановки индексов импульсов,



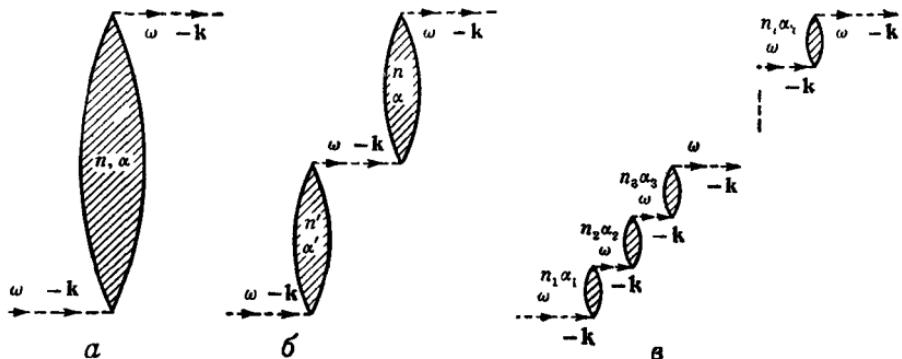
Фиг. 119.

спина и энергии, учитывающий все требования, вытекающие из законов сохранения. Затем уже можно записать соответствующий вклад.

1. Неприводимая, или собственная, поляризация

Некоторые свойства разложения функции $F(k, \omega)$, как и разложения функции $G(k, \omega)$, позволяют упростить рассмотрение; теория также во многом аналогична. Имеется и некоторое различие. В то время как в результате приведения диаграмм, дающих вклад в G , возникает цепочка поддиаграмм, соединенных между собой одночастичными пропагаторными линиями, здесь приведение дает цепочку поддиаграмм, соединенных отдельными вершинными линиями.

Как и раньше, начнем с некоторых определений. Любая диаграмма типа показанной на фиг. 119 ($n \geq 0$) называется поляризационной диаграммой. Символически она показана на фиг. 120, а. Такую диаграмму или возможно, или невозможно представить в форме диаграммы на фиг. 120, б (у изображенной промежуточной вершины в силу законов сохранения индексы энергии и импульса обязательно совпадают с таковыми на концах линий). В первом случае диаграмма называется приводимой, а во втором — неприводимой. Так на фиг. 115, например,



Фиг. 120.

диаграмма *a* приводима, а другие неприводимы; на фиг. 116 диаграммы группы *a* приводимы, а остальные — нет (см. ниже). У приводимой диаграммы можно назвать отдельные поддиаграммы поляризационными частями. Очевидно, что приведение диаграммы можно продолжать до тех пор, пока не придем к диаграмме на фиг. 120, *в*, у которой все поддиаграммы неприводимы. В этом случае мы имеем последовательность неприводимых поляризационных частей, причем каждые две соседние части имеют общую вершину и каждой вершине соответствует передача одинаковых импульса и энергии.

Теперь для рассматриваемой теории нужно получить аналог соотношения (7.4), а именно показать, что если диаграмму на фиг. 120, *б* изобразить более подробно, как на фиг. 121, то будем иметь

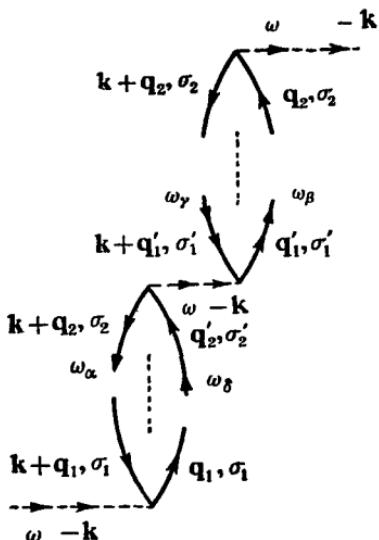
$$F_{q_1\sigma_1}^{(na)}(k, \omega) = -v_k \sum_{q'_2\sigma'_2} F_{q'_2\sigma'_2}^{(n'a')}(k, \omega) \sum_{q'_1\sigma'_1} F_{q'_1\sigma'_1}^{(n''a'')}(k, \omega). \quad (12.9)$$

Суммируя по переменным q и σ [напомним (8.8)], получаем непосредственное обобщение этого результата

$$F^{(na)}(k, \omega) = -v_k F^{(n'a')}(k, \omega) F^{(n''a'')}(k, \omega). \quad (12.10)$$

Эти соотношения представляют собой обобщение соотношений (12.6) и (12.7) соответственно и являются аналогом соотношения (7.4) в теории одночастичной функции Грина.

Доказательство соотношения (12.9) очень несложно, не следует только смущаться обилием символов, используемых при записи. Вообще говоря, предлагаемое доказательство основано



Фиг. 121.

на том, что вклады линии взаимодействия и двух поляризационных частей разделяются и образуют два сомножителя в (12.9). Соотношение (12.8) можно записать в более явном виде

$$\begin{aligned}
 F_{\substack{\mathbf{q}_1, \sigma_1 \\ \mathbf{q}_2, \sigma_2}}^{(n\alpha)} = & i^{n-1} (-1)^l \sum_{KLMN} \left\{ \langle KL | v | NM \rangle \dots \right. \\
 & \left. \dots \langle \mathbf{k} + \mathbf{q}'_2 \sigma'_2 \mathbf{q}'_1 \sigma'_1 | v | \mathbf{q}'_2 \sigma'_2 \mathbf{k} + \mathbf{q}'_1 \sigma'_1 \rangle \dots \right. \\
 & \times \mathbf{Y} \mathbf{Z} \mathbf{T} \dots \langle XY | v | TZ \rangle \times \\
 & \times \delta_K * \dots \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{q}'_2 \sigma'_2} * \delta_{\mathbf{q}'_2 \sigma'_2} * \delta_{\mathbf{q}'_1 \sigma'_1} * \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{q}'_1 \sigma'_1} * \dots \times \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_\alpha}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_\delta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_\gamma}{2\pi} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_{2n_X}}{2\pi} \\
 & \times G_0(K, \omega_1) \dots G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}'_2, \omega_\alpha) G_0(\mathbf{q}'_2, \omega_\delta) G_0(\mathbf{q}'_1, \omega_\beta) \times \\
 & \times G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}'_1, \omega_\gamma) \dots G_0(T, \omega_{2n}) 2\pi\delta(\omega_\xi - \omega_\eta - \omega) \times \\
 & \times 2\pi\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \dots 2\pi\delta(\omega_\alpha + \omega_\beta - \omega_\gamma - \omega_\delta) 2\pi \dots \times \\
 & \left. \times 2\pi\delta(\omega + \omega_\lambda - \omega_\mu) \right\}. \quad (12.11)
 \end{aligned}$$

Здесь мы использовали возможность [см. замечания после (12.8) и (12.4) и т. д.] избавиться от δ -функции $2\pi\delta(\omega_\alpha + \omega_\beta - \omega_\gamma - \omega_\delta)$ и заменить произведение дираковских δ -функций множителем $2\pi\delta(\omega_\xi - \omega_\eta + \omega)$. Для рассматриваемой конкретной вершины матричный элемент потенциала взаимодействия равен просто v_k , в связи с чем его можно вынести за знак суммирования. Тогда (12.11) записывается в виде

$$\begin{aligned}
 F_{q_1 \sigma_1}^{(n\alpha)}(k, \omega) = & i^{n-1} v_k (-)^l \left\{ \sum_{q_2 \sigma_2} \sum_{KLMN} \langle KL|v|NM \rangle \times \right. \\
 & \times \langle k + q'_2 \sigma'_2 q'_1 \sigma'_1 | v | q'_2 \sigma'_2 k + q'_1 \sigma'_1 \rangle \delta_K * \dots \delta_{k+q'_2 \sigma'_2} * \delta_{q'_2 \sigma'_2} * \times \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_n}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_\delta}{2\pi} G_0(K, \omega_1) \dots \times \\
 & \times G_0(k + q'_2, \omega_\alpha) G_0(q'_2, \omega_\delta) 2\pi\delta(\omega_\xi - \omega_\eta + \omega) \times \\
 & \times 2\pi\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \dots 2\pi\delta(\omega_\alpha + \omega_\beta - \omega_\gamma - \omega_\delta) \Big\} \times \\
 & \times (-1)^{l''} \left\{ \sum_{q'_1 \sigma'_1} \sum_{\substack{q'_1 \sigma'_1 \\ q'_1 \sigma'_1 q'_2 \sigma'_2}} \langle k + q'_2 \sigma'_2 q'_1 \sigma'_1 | v | q'_2 \sigma'_2 k + q'_1 \sigma'_1 \rangle \dots \right. \\
 & \quad \text{XYZT} \dots \langle XY|v|TZ \rangle \delta_{q'_1 \sigma'_1} * \delta_{k+q'_1 \sigma'_1} * \dots \delta_T * \times \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_\gamma}{2\pi} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_{2n}}{2\pi} G_0(q'_1, \omega_\beta) \times \\
 & \times G_0(k + q'_1, \omega_\gamma) \dots G_0(T, \omega_{2n}) 2\pi\delta(\omega_\alpha + \omega_\beta - \omega_\gamma - \omega_\delta) \times \\
 & \left. \times 2\pi \dots 2\pi \delta(\omega + \omega_\lambda - \omega_\mu) \right\}. \tag{12.12}
 \end{aligned}$$

Необходимо сделать два следующих замечания относительно этого выражения. Прежде всего следует указать, что в нем перечеркнуты члены, на которых обрываются соответствующие суммы и произведения. Далее, l' и l'' означают соответственно число петель в верхней и нижней поляризационных частях. В силу самой природы рассматриваемой диаграммы $l = l' + l''$, что было использовано при переходе от (12.11) к (12.12). Применив теперь (12.11) к составным частям (12.12), находим

$$\begin{aligned}
 F_{q_1 \sigma_1}^{(n\alpha)}(k, \omega) = & i^{n-1} v_k \left\{ \frac{1}{i^{n'-1}} \sum_{q'_2 \sigma'_2} F_{q_1 \sigma_1}^{(n'\alpha')} (k, \omega) \right\} \times \\
 & \times \left\{ \frac{1}{i^{n''-1}} \sum_{q'_1 \sigma'_1} F_{q_1 \sigma_1}^{(n''\alpha'')} (k, \omega) \right\}. \tag{12.13}
 \end{aligned}$$

Если теперь воспользоваться соотношением для полного числа вершин $n' + n'' + 1 = n$, которое можно получить простым подсчетом вершин, то (12.13) переходит в (12.9), что и требовалось доказать.

Теперь с учетом § 7 становится более понятным, почему любую диаграмму мы стремились привести к неприводимой форме. Продолжая процесс приведения от диаграммы b к a на фиг. 120 и используя повторно (12.10), получаем соотношение

$$F^{(na)}(\mathbf{k}, \omega) = (-v_k)^{t-1} F^{(n_1 a_1)}(\mathbf{k}, \omega) F^{(n_2 a_2)}(\mathbf{k}, \omega) \dots F^{(n_t a_t)}(\mathbf{k}, \omega), \quad (12.14)$$

которое можно сравнить с (7.5).

По аналогии с неприводимой собственно-энергетической частью (7.7) определим величину $Q(\mathbf{k}, \omega)$ соотношением

$$Q = \sum_{n, a} F^{(na)} \quad (12.15)$$

и назовем ее неприводимым (или собственным) поляризационным оператором. Оказывается, что эта величина совпадает с функцией Q , входящей в (9.9). Действительно, главным членом разложения является величина $F^{(0)}$, которая определяется соотношением (6.15) и описывается диаграммой на фиг. 117. Члены первого порядка вычисляются с помощью диаграмм на фиг. 115, кроме диаграммы a , и т. д. Теперь воспользуемся методом, подобным использованному для получения дайсоновского соотношения (7.8), а именно запишем все (приводимые и неприводимые) вклады в F в виде ряда по возрастающим степеням порядка вершины и расположим их затем по степеням v_k :

$$F = Q - v_k Q^2 + v_k^2 Q^3 - \dots = \frac{Q}{1 + v_k Q}. \quad (12.16)$$

Таким образом, мы приходим к (9.9). Вместе с (12.15), (9.10) и (9.11) это уравнение имеет для нас фундаментальное значение, так как оно дает метод систематического исследования диэлектрической проницаемости и коллективных возбуждений.

2. Диэлектрическая проницаемость, зависящая от частоты и волнового вектора

Практически обычно при приближенном вычислении Q ограничиваются наиболее важными членами ряда (12.15). Например, при достаточно слабом взаимодействии существен только член $F^{(0)}$, не зависящий от v_k . Даже при более сильном взаимодействии приходится ограничиваться таким приближением из-за математических трудностей, возникающих при попытках полу-

чить более точный результат. Поэтому рассмотрим в качестве примера

$$Q \approx F^{(0)} = 2 \sum_{|k+q| > k_f > |q|} \left\{ \frac{1}{\omega - (\epsilon_{k+q} - \epsilon_q - i0)} - \frac{1}{\omega + (\epsilon_{k+q} - \epsilon_q - i0)} \right\}. \quad (12.17)$$

Тогда в силу (12.16) имеем

$$F \approx F^{(0)} - v_k F^{(0)2} + v_q^2 F^{(0)3} - \dots, \quad (12.18)$$

что равнозначно суммированию в (11.6) бесконечной подпоследовательности

$$\left(\textcircled{1} \right) + \left(\textcircled{0} \right) + \left(\textcircled{0} \right) \left(\textcircled{0} \right)^* + \dots \quad (12.19)$$

При этом из (9.10) получаем диэлектрическую проницаемость

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + v_k F^{(0)}(k, \omega) = \epsilon_{RPA}(k, \omega), \quad (12.20)$$

где при написании последнего равенства использовано соотношение (5.4.19). Таким образом, мы вернулись к приближению случайных фаз (RPA), рассмотренному в гл. 5, где подробно исследовались решения уравнения $\epsilon_{RPA}(k, \omega) = 0$. Здесь мы ограничимся просто повторением того, что эти решения представляют собой простейшее математическое описание плазмонов (если $v_k = 4\pi/\Omega k^2$) и нулевого звука (если значение v_k конечно при $k \rightarrow 0$).

Примеры приближений, в которых учитываются следующие после $F^{(0)}$ члены ряда (12.15), читатель может найти в работах Дюбуа [56] (плазменные колебания) и Готтфрида и Пикмэна [87] (нулевой звук).

§ 13. ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Выше мы видели, что с помощью метода функций Грина можно получить результаты предыдущих глав, относящиеся к случаю нулевой температуры. В то же время этот метод представляет собой гораздо более мощную основу для исследования проблемы многих частиц.

В настоящем параграфе мы обобщим понятие функций Грина на случай систем с конечной температурой и установим связь между методом, развитым в гл. 9 и в настоящей главе.

1. Определения

Напомним сначала, что мы использовали обозначение $\langle\langle\theta\rangle\rangle$ для среднего значения оператора θ в случае термодинамически равновесной системы с гамильтонианом H . Как и в гл. 9, будем пользоваться большим каноническим ансамблем; тогда $\langle\langle\theta\rangle\rangle$ определяется в виде

$$\langle\langle\theta\rangle\rangle = \frac{\text{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)} \theta]}{\text{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)}]}, \quad (13.1)$$

где $\beta = 1/k_B T$, μ — химический потенциал, а N — оператор числа частиц, который выражается через гейзенберговские полевые операторы

$$N = \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}t) \psi(\mathbf{r}t). \quad (13.2)$$

Теперь можно определить одно- и двухчастичную функции Грина

$$G(x_1, x_2) = i \langle\langle T(\psi(x_1) \psi^\dagger(x_2)) \rangle\rangle, \quad (13.3)$$

$$G(x_1, x_2; x_3, x_4) = i \langle\langle T(\psi(x_1) \psi(x_2) \psi^\dagger(x_3) \psi^\dagger(x_4)) \rangle\rangle, \quad (13.4)$$

где мы обозначили \mathbf{r} , t через x , а T представляет собой обычный оператор временного упорядочения. Эти определения являются очевидным обобщением определений в § 2. Подобным же образом можно ввести многочастичные функции Грина. Как и в § 2, представим $G(x_1, x_2)$ в виде суммы запаздывающей и опережающей частей:

$$G(x_1, x_2) = G^{(r)}(x_1, x_2) + G^{(a)}(x_1, x_2), \quad (13.5)$$

где

$$G^{(r)}(x_1, x_2) = \begin{cases} i \langle\langle \psi(x_1) \psi^\dagger(x_2) \rangle\rangle & \text{при } t_1 > t_2, \\ 0 & \text{при } t_2 > t_1, \end{cases} \quad (13.6)$$

$$G^{(a)}(x_1, x_2) = \begin{cases} -i \langle\langle \psi^\dagger(x_2) \psi(x_1) \rangle\rangle & \text{при } t_2 > t_1, \\ 0 & \text{при } t_1 > t_2. \end{cases} \quad (13.7)$$

Функция $G(x_1, x_2)$ имеет тот же физический смысл, как и ранее. Если $t_1 > t_2$, то функция $G(x_1, x_2)$ описывает рождение частицы в точке \mathbf{r}_2 в момент времени t_2 и ее уничтожение в точке \mathbf{r}_1 в более поздний момент t_1 , когда система возвращается в состояние термодинамического равновесия. Если $t_2 > t_1$, то функция $G(x_1, x_2)$ описывает возмущение системы из состояния термодинамического равновесия путем изъятия из нее частицы в точке \mathbf{r}_1 и последующее возвращение системы в прежнее состояние в результате добавления частицы в точку \mathbf{r}_2 . Аналогичный физический смысл имеет функция $G(x_1, x_2; x_3, x_4)$.

Если гамильтониан системы не зависит от времени и, кроме того, инвариантен относительно поворота и сдвига пространственных осей, то функция $G(x_1, x_2)$ зависит только от $|r_1 - r_2|$ и $t_1 - t_2$.

Так же как и при рассмотрении систем с нулевой температурой, часто удобно использовать переменные k и ω . Как и прежде, будем применять то же самое обозначение G для функций Грина всех типов, чтобы избежать чрезмерного количества символов. Надеемся, что читатель сможет определить тип функций Грина, какой может встречаться в тех или иных уравнениях, исходя из контекста, а также учитывая аргументы этих функций. Отметим также, что в настоящем параграфе функции Грина зависят от β , хотя это и не указывается явно.

2. Основные свойства и правило сумм

Сначала обобщим определение функций $G^{(a)}$ и $G^{(r)}$ на область мнимых значений времени.

Определение этих функций Грина для действительных времен предполагает, что множитель $e^{-\beta(H-\mu N)}$ заведомо обеспечивает абсолютную сходимость шпера.

Так как $G^{(a)}(x_1, x_2)$ можно записать в виде

$$G^{(a)}(x_1, x_2) = - \frac{i \operatorname{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)} e^{iHt_2} \psi^+(r_2, 0) e^{-iH(t_2-t_1)} \psi(r_1, 0) e^{-iHt_1}]}{\operatorname{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)}]}, \quad (13.8)$$

то отсюда следует, что $G^{(a)}(x_1, x_2)$ является аналитической функцией комплексной переменной при $0 < \operatorname{Im}(t_1 - t_2) < \beta$. Аналогично функция $G^{(r)}(x_1, x_2)$ аналитична при $0 > \operatorname{Im}(t_1 - t_2) > -\beta$.

Это и есть требуемые аналитические продолжения. Получим теперь соотношение между запаздывающей и опережающей одночастичными функциями Грина.

Рассмотрим соотношение

$$\begin{aligned} \{G^{(a)}(x_1, x_2)\}_{t_1=0} &= -i \langle\langle \psi^+(x_2) \psi(x_1) \rangle\rangle = \\ &= -i \frac{\operatorname{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)} \psi^+(x_2) \psi(r_1, 0)]}{\operatorname{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)}]} = \\ &= - \frac{i \operatorname{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)} e^{\beta(H-\mu N)} \psi(r_1, 0) e^{-\beta(H-\mu N)} \psi^+(x_2)]}{\operatorname{Sp} [e^{-\beta(H-\mu N)}]} = \\ &= -i \langle\langle e^{\beta(H-\mu N)} \psi(r_1, 0) e^{-\beta(H-\mu N)} \psi^+(x_2) \rangle\rangle. \quad (13.9) \end{aligned}$$

При переходе от второй к третьей строчке мы воспользовались свойством инвариантности шпера от произведения операторов относительно их циклической перестановки.

Коммутационное соотношение для оператора числа частиц и $\psi(\mathbf{r}, 0)$ имеет вид

$$[N, \psi] = N\psi(\mathbf{r}, 0) - \psi(\mathbf{r}, 0)N = -\psi,$$

откуда

$$\psi(\mathbf{r}, 0)N = (N + 1)\psi(\mathbf{r}, 0) \quad (13.10)$$

и, следовательно,

$$\psi(\mathbf{r}_1, 0)e^{\beta\mu N} = e^{\beta\mu(N+1)}\psi(\mathbf{r}_1, 0), \quad (13.11)$$

или

$$e^{-\beta\mu N}\psi(\mathbf{r}_1, 0)e^{\beta\mu N} = e^{\beta\mu}\psi(\mathbf{r}_1, 0). \quad (13.12)$$

Также можно записать

$$e^{\beta H}\psi(\mathbf{r}_1, 0)e^{-\beta H} = \psi(\mathbf{r}_1, -i\beta); \quad (13.13)$$

таким образом, мы ввели гейзенберговские операторы с мнимыми временными аргументами.

Подставляя (13.11) и (13.13) в (13.9), получаем

$$\begin{aligned} \{G^{(a)}(x_1, x_2)\}_{t_1=0} &= -i\langle\langle e^{\beta\mu}\psi(\mathbf{r}_1, -i\beta)\psi^\dagger(x_2)\rangle\rangle = \\ &= -e^{\beta\mu}\{G^{(r)}(x_1, x_2)\}_{t_1=-i\beta} \end{aligned}$$

т. е.

$$G^{(a)}(\mathbf{r}, t) = -e^{\beta\mu}G^{(r)}(\mathbf{r}, t - i\beta). \quad (13.14)$$

Если определить фурье-образы этих функций Грина

$$\begin{aligned} G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) &= \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\omega t} G^{(a)}(\mathbf{r}, t), \\ G^{(r)}(\mathbf{k}, \omega) &= \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\omega t} G^{(r)}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (13.15)$$

то (13.14) можно записать в форме соотношения между ними

$$G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) = -e^{-\beta(\omega-\mu)}G^{(r)}(\mathbf{k}, \omega). \quad (13.16)$$

Спектральная функция $A(\mathbf{k}, \omega)$ определяется следующим образом:

$$A(\mathbf{k}, \omega) = G^{(r)}(\mathbf{k}, \omega) - G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega). \quad (13.17)$$

Вводя

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1}, \quad (13.18)$$

можно записать

$$G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) = -f(\omega) A(\mathbf{k}, \omega) \quad (13.19)$$

и

$$G^{(r)}(\mathbf{k}, \omega) = [1 - f(\omega)] A(\mathbf{k}, \omega). \quad (13.20)$$

Представим теперь $A(\mathbf{k}, \omega)$ через полевые операторы:

$$A(\mathbf{k}, \omega) = i \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\omega t} [\langle\langle \{\psi(x)\psi^+(0) + \psi^+(0)\psi(x)\} \rangle\rangle],$$

откуда

$$\begin{aligned} \int \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega) &= i \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [\langle\langle \{\psi(\mathbf{r}, 0)\psi^+(0) + \psi^+(0)\psi(\mathbf{r}, 0)\} \rangle\rangle] = \\ &= i \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - 0) = i, \end{aligned}$$

т. е.

$$\int A(\mathbf{k}, \omega) d\omega = 2\pi i. \quad (13.21)$$

Это равенство является примером „правила сумм“. Мы не будем здесь приводить полный список подобных правил, а просто порекомендуем интересующемуся читателю работу Мартина и Швингера [145], где можно найти и другие ссылки.

3. Невзаимодействующие фермионы

Для иллюстрации вновь введенных понятий рассмотрим простейший случай невзаимодействующих частиц. Здесь почти сразу находим

$$\begin{aligned} G_0^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) &= \int d\mathbf{r} \int dt e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\omega t} G^{(a)}(\mathbf{r}, t) = \\ &= -i \int \int dt e^{i\omega t} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle\langle \psi^+(\mathbf{r}, t_2) \psi(0, t_1) \rangle\rangle d\mathbf{r} = \end{aligned} \quad (13.22)$$

$$= -i \int dt e^{i\omega t} \langle\langle a_{k0}^\dagger a_{kt} \rangle\rangle = -i 2\pi \delta(\omega - \epsilon_k) \langle\langle a_k^\dagger a_k \rangle\rangle. \quad (13.23)$$

Аналогичным образом получаем

$$G_0^{(r)}(\mathbf{k}, \omega) = i 2\pi \delta(\omega - \epsilon_k) \langle\langle a_k a_k^\dagger \rangle\rangle. \quad (13.24)$$

Тогда из (13.19) имеем

$$A_0(\mathbf{k}, \omega) = i 2\pi \delta(\omega - \epsilon_k) \quad (13.25)$$

в соответствии с правилом сумм (13.21). Для среднего числа частиц в состоянии \mathbf{k} , которое можно найти из (13.20), имеем соотношение

$$\langle\langle n(\mathbf{k}) \rangle\rangle = \langle\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle\rangle = f(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\exp\{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)\} + 1}, \quad (13.26)$$

т. е. обычный результат статистической механики.

4. Большая статистическая сумма

Получим теперь выражение для большой статистической суммы Z_G через функции Грина. Напомним сначала приведенное в гл. 9 определение большой статистической суммы

$$Z_G = \text{Sp} [e^{-\beta(H^{(g)} - \mu_N)}], \quad (13.27)$$

где

$$H^{(g)} = H_0 + gV. \quad (13.28)$$

Как было показано в гл. 9 [см. (9.5.4)], можно записать

$$\ln Z_G = \ln Z_G^0 - \beta \int_0^1 \frac{dg}{g} \langle\langle gV \rangle\rangle, \quad (13.29)$$

где Z_G^0 — большая статистическая сумма для невзаимодействующих частиц. Теперь нам нужно выразить $\langle\langle gV \rangle\rangle$ через функции Грина.

Из уравнения движения полевого оператора $\psi(\mathbf{r}, t)$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = [\psi, H] \quad (13.30)$$

и коммутационных соотношений для ψ и ψ^\dagger находим

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}, t) = g \int dx' v(x - x') \psi^\dagger(x') \psi(x') \psi(\mathbf{r}, t), \quad (13.31)$$

откуда

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(\mathbf{r}', t') i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) &= \psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \psi(\mathbf{r}, t) + \\ &+ g \int dx'' \psi^\dagger(\mathbf{r}', t') \psi^\dagger(x'') v(x - x'') \psi(x'') \psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (13.32)$$

Положим $x = x'$, произведем усреднение по большому каноническому ансамблю и проинтегрируем по x . В результате получаем

$$\left[\pm \frac{\partial}{\partial t} G^{(a)}(x_1, x_2) \right]_{x_1=x_2} = \langle\langle H_0 \rangle\rangle + 2 \langle\langle gV \rangle\rangle. \quad (13.33)$$

Далее

$$\langle\langle H_0 \rangle\rangle = \left[-\frac{\nabla_1^2}{2m} G^{(a)}(x_1, x_2) \right]_{x_1=x_2}, \quad (13.34)$$

откуда

$$\langle\langle gV \rangle\rangle = \left\{ \frac{1}{2} \left[-\frac{\partial}{\partial t} + i \frac{\nabla_1^2}{2m} \right] G^{(a)}(x_1, x_2) \right\}_{x_1=x_2} = \quad (13.35)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ -\frac{\partial}{\partial t} + i \frac{\nabla^2}{2m} \int G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} \frac{d\mathbf{k} d\omega}{(2\pi)^4} \right\}_{\mathbf{r}=0} =$$

$$= \int \frac{1}{2} \left\{ i\omega - i \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \right\} G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) \frac{d\omega d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} =$$

$$= \int \frac{d\omega d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \left(-\frac{i}{2} \right) \left(-\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + \omega \right) f(\omega) A(\mathbf{k}, \omega). \quad (13.36)$$

Объединяя (13.29) и (13.36), получаем

$$\ln Z_G = \ln Z_G^0 + \beta \int_0^1 \frac{dg}{g} \frac{d\omega d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \frac{i}{2} \left(-\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + \omega \right) f(\omega) A(\mathbf{k}, \omega). \quad (13.37)$$

Таким образом, зная функции Грина [или $A(\mathbf{k}, \omega)$], можно определить Z_G , а следовательно, и термодинамические свойства системы.

5. Физическая интерпретация спектральной функции

Выше (см. п. 3) мы показали, что для системы с гамильтонианом

$$H_0 = \sum \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}t}^{\dagger} a_{\mathbf{k}t}.$$

$f(\epsilon_{\mathbf{k}})$ является средним (по большому каноническому ансамблю) числом заполнения состояний с энергией $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Этот результат можно обобщить следующим образом. Если гамильтониан системы привести к виду

$$H = \sum \epsilon_l b_l^{\dagger} b_l,$$

где b_l и b_l^{\dagger} — записанные в представлении вторичного квантования операторы рождения и уничтожения частицы в состоянии с энергией ϵ_l , то среднее число заполнения для состояния с индексом l будет $f(\epsilon_l)$.

Пусть $a_{\mathbf{k}}(\omega)$ — фурье-образ оператора $a_{\mathbf{k}t}$ для состояния $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, имеющего вид плоской волны $\Omega^{-1/2}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Тогда можно записать

$$G^{(a)}(x_1, x_2) = \int -i \langle\langle a_{\mathbf{k}'}^\dagger(\omega') a_{\mathbf{k}''}(\omega'') \rangle\rangle \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_2}}{(2\pi)^3} \times \\ \times e^{i\omega't_2} d\mathbf{k}' d\omega' \frac{e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^3} e^{-i\omega''t_1} d\mathbf{k}'' d\omega''.$$

Отсюда получаем

$$G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) = -i \langle\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger(\omega) a_{\mathbf{k}}(\omega) \rangle\rangle = -f(\omega) A(\mathbf{k}, \omega). \quad (13.38)$$

Следовательно, в общем случае среднее число заполнения любого состояния с импульсом \mathbf{k} и энергией ω подчиняется уравнению

$$-\frac{1}{i} G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{i} f(\omega) A(\mathbf{k}, \omega).$$

Так как $f(\omega)$ — среднее число заполнения состояния с энергией ω , член $A(\mathbf{k}, \omega)/i$ является „весовым множителем“, определяющим возможные значения энергии ω для состояния с импульсом \mathbf{k} . Как нетрудно понять из сказанного, правило сумм (13.21) представляет собой просто утверждение, что полный вес должен быть равен единице.

Плотность частиц в точке \mathbf{r} , t равна $\langle\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \rangle\rangle$ и не зависит от \mathbf{r} и t . Обозначая ее через n , находим

$$n = \int \frac{d\mathbf{k} d\omega}{(2\pi)^4} \frac{G^{(a)}(\mathbf{k}, \omega)}{(-i)}. \quad (13.39)$$

Для системы свободных частиц $A_0(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi i\delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})$; полная плотность числа частиц с импульсом \mathbf{k} , следовательно, равна

$$\langle\langle n(\mathbf{k}) \rangle\rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \langle\langle n(\mathbf{k}, \omega) \rangle\rangle = f(\epsilon_{\mathbf{k}}). \quad (13.40)$$

6. Уравнения движения

После того как задача статистической механики сведена к нахождению функций Грина, для вычисления последних обычно применяют теорию возмущений в какой-либо ее форме.

Выше в настоящей главе была подробно рассмотрена диаграммная техника. Поэтому здесь мы сосредоточим внимание на выводе уравнений, которым подчиняются функции Грина. Способ их решения должен, конечно, определяться физической природой рассматриваемой системы.

Начнем, естественно, с гейзенберговских уравнений движения для полевых операторов

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = [\psi, H]. \quad (13.41)$$

В явном виде

$$[H_0, \psi(x)] = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x), \quad (13.42)$$

$$[H_0, \psi^\dagger(x)] = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^\dagger(x) \quad (13.43)$$

и

$$[V, \psi(x)] = -g \int v(x-x') \psi^\dagger(x') \psi(x') dx' \psi(x), \quad (13.44)$$

$$[V, \psi^\dagger(x)] = g \int \psi^\dagger(x') v(x-x') \psi(x') dx' \psi^\dagger(x), \quad (13.45)$$

где

$$\begin{aligned} v(x-x') &= v(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \delta(t-t'), \\ dx' &= d\mathbf{r}' dt'. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t_1} G(x_1, x_2) &= -\frac{\partial}{\partial t_1} [\theta(t_1 - t_2) \langle\langle \psi(x_1) \psi^\dagger(x_2) \rangle\rangle] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial t_1} [\theta(t_2 - t_1) \langle\langle \psi^\dagger(x_2) \psi(x_1) \rangle\rangle] = -\delta(t_1 - t_2) \langle\langle \psi(x_1) \psi^\dagger(x_2) + \\ &+ \psi^\dagger(x_2) \psi(x_1) \rangle\rangle = i \langle\langle T([\psi(x_1), H], \psi^\dagger(x_2)) \rangle\rangle - \delta^4(x_1 - x_2). \end{aligned} \quad (13.46)$$

Подставляя сюда значение коммутатора и перегруппировывая члены, получаем

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} \right) G(x_1, x_2) &= \\ &= -\delta^4(x_1 - x_2) + g \int dx' v(x_1 - x') G(\mathbf{r}', t', x_1; \mathbf{r}', t', x_2). \end{aligned} \quad (13.47)$$

Отметим, что в уравнение для одночастичной функции Грина входит двухчастичная функция Грина.

Уравнение (13.47) можно записать с использованием функции $G_0(x_1, x_2)$, удовлетворяющей уравнению

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} \right) G_0(x_1, x_2) = -\delta^4(x_1 - x_2). \quad (13.48)$$

Отсюда следует, что $G_0(x_1, x_2)$ является одночастичной функцией Грина системы невзаимодействующих частиц.

Далее, запишем (13.47) в виде

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m} \right) G(x_1, x_2) = -\delta^4(x_1 - x_2) + \int dx' M(x_1, x') G(x', x_2), \quad (13.49)$$

где M — неприводимая собственно-энергетическая часть (массовый оператор) для конечных температур.

Тогда

$$G(x_1, x_2) = G_0(x_1, x_2) + + \int G_0(x_1, x') M(x', x'') G(x'', x_2) dx' dx''. \quad (13.50)$$

Формально можно записать

$$G = G_0 + G_0 MG \quad (13.51)$$

и перейти к разложению по степеням константы взаимодействия, так же как в случае нулевой температуры.

Уравнение для двухчастичной функции Грина $G(x_1, x_2; x_3, x_4)$ можно получить таким же способом. Оно имеет вид

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t_1} G(x_1, x_2; x_3, x_4) &= i \langle\langle T([\psi(x_1), H] \psi(x_2) \psi^\dagger(x_3) \psi^\dagger(x_4)) \rangle\rangle + \\ &+ \delta^3(x_1 - x_3) \langle\langle T(\psi(x_2) \psi^\dagger(x_4)) \rangle\rangle - \delta^3(x_1 - x_4) \langle\langle T(\psi(x_2) \psi^\dagger(x_3)) \rangle\rangle = \\ &= i\delta^3(x_1 - x_3) G(x_2, x_4) - iG(x_2, x_3) \delta^3(x_1 - x_4) - \\ &- i \langle\langle T \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \psi(x_1) - \right. \right. \\ &\left. \left. - g \int dx' v(r - r') \psi^\dagger(r') \psi(r') \psi(x_1) \right\} \psi(x_2) \psi^\dagger(x_3) \psi^\dagger(x_4) \rangle\rangle, \quad (13.52) \end{aligned}$$

откуда следует

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \right) G(x_1, x_2; x_3, x_4) &= \\ &= -i\delta^3(x_1 - x_3) G(x_2, x_4) + i\delta^3(x_1 - x_4) G(x_2, x_3) - \\ &- g \int dx' v(x_1 - x') G(r', t', x_1, x_2; r', t', x_3, x_4). \quad (13.53) \end{aligned}$$

В уравнение для двухчастичной функции Грина входит трехчастичная функция Грина. Очевидно, что в общем случае в уравнение для n -частичной функции Грина будет входить не только $(n-1)$ - δ , но и $(n+1)$ -частичная функция Грина. Следовательно, чтобы получить точное решение уравнения для какой-либо функции Грина, необходимо решить бесконечную систему зацепляющихся уравнений. Ясно, что это сделать невозможно. Выход из этого затруднения для двухчастичной функции Грина

(подобным же образом можно поступить и для других многочастичных функций Грина) состоит в том, что уравнение (13.53) записывают только через одно- и двухчастичные функции Грина, причем последний его член представляют в виде

$$\int \Gamma(x_1, x_2; x_5, x_6) G(x_5, x_6; x_3, x_4) dx_5 dx_6.$$

Таким образом, по аналогии с оператором M для одиночастичной функции Грина вводится новый оператор Γ .

Теперь можно записать интегральное уравнение для двухчастичной функции Грина, в которое будут входить как возмущенные, так и невозмущенные одиночастичные функции Грина:

$$\begin{aligned} G(x_1, x_2; x_3, x_4) = & iG_0(x_1, x_3) G(x_2, x_4) - iG_0(x_1, x_4) G(x_2, x_3) + \\ & + \int G_0(x_1, x_5) G_0(x_2, x_6) \Gamma(x_5, x_6; x_7, x_8) G(x_7, x_8; x_5, x_6) \times \\ & \times dx_5 dx_6 dx_7 dx_8. \end{aligned} \quad (13.54)$$

Здесь для оператора Γ также можно использовать разложение по теории возмущений или какие-либо другие приближения, основанные на физической интуиции. Мы не будем на них останавливаться, а перейдем к рассмотрению некоторых важных приложений метода функций Грина.

7. Границные условия

Уравнение (13.47) является дифференциальным уравнением первого порядка, поэтому для однозначного определения его решения необходимо задать граничное условие.

В качестве такого граничного условия можно использовать уравнение (13.14), записав его в следующей форме:

$$\{G(x_1, x_2)\}_{t=0} = -e^{\beta\mu} G(x_1, x_2)_{t=-i\beta}, \quad (13.55)$$

где мы аналитически продолжили функции Грина на область мнимых значений времени. Теперь разложим $G(k, t - t')$ в ряд Фурье

$$G(k, t - t') = \frac{1}{i\beta} \sum_v e^{-iZ_v(t-t')} G(k, Z_v) \text{ при } 0 \leqslant it, it' \leqslant \beta, \quad (13.56)$$

где

$$Z_v = \frac{\pi v}{-i\beta} + \mu, \quad (13.57)$$

v — нечетное целое число.

Соотношение, обратное (13.56), имеет вид

$$G(\mathbf{k}, Z_v) = \int_0^{-i\beta} dt e^{Z_v(t-t')} G(\mathbf{k}, t-t'), \quad (13.58)$$

при этом интеграл не зависит от t' . Так как

$$G(\mathbf{k}, t) = G^{(r)}(\mathbf{k}, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} [1 - f(\omega) A(\mathbf{k}, \omega)] e^{i\omega t}, \quad (13.59)$$

функция

$$G(\mathbf{k}, Z_v) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{1 + e^{-\beta(\omega-\mu)}} \int_0^{-\beta} dt e^{i\omega t} e^{i([\pi v/-i\beta]+\mu)t} = \\ = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{iA(\mathbf{k}, \omega)}{(Z_v - \omega)} \quad (13.60)$$

определяет фурье-коэффициенты.

Если аналитически продолжить $G(\mathbf{k}, Z)$ на значения Z , отличные от

$$Z = Z_v = \frac{\pi v}{-i\beta} + \mu,$$

то можно определить $A(\mathbf{k}, \omega)$ как величину скачка функции $G(\mathbf{k}, Z)$ при пересечении действительной оси

$$A(\mathbf{k}, \omega) = [G(\mathbf{k}, \omega + i\epsilon) - G(\mathbf{k}, \omega - i\epsilon)]. \quad (13.61)$$

В качестве примера рассмотрим уравнение

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} \right) G_0(x_1, 0) = -\delta^4(x_1). \quad (13.62)$$

Умножая его на $\exp \left\{ -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1 + i \left(\frac{\pi v}{-i\beta} + \mu \right) t_1 \right\}$ и интегрируя по x_1 , получаем

$$\left[-\left(\frac{\pi v}{-i\beta} + \mu \right) - \frac{\mu^2}{2m} \right] G_0(\mathbf{k}, Z_v) = -1, \quad (13.63)$$

следовательно,

$$G_0(\mathbf{k}, Z_v) = \frac{-1}{Z_v - k^2/2m}.$$

Аналитическое продолжение этой функции имеет вид

$$G_0(\mathbf{k}, Z) = \frac{-1}{Z - k^2/2m},$$

откуда вытекает полученное ранее соотношение

$$A_0(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi i \delta \left(\omega - \frac{k^2}{2m} \right).$$

Мы дали чрезвычайно краткое вводное изложение уравнений движения, граничных условий и аналитического продолжения функций Грина на плоскости комплексных значений времени или энергии. Применению метода функций Грина к различным физическим проблемам посвящено очень много работ, число которых непрерывно растет. Более подробное изложение читатель может найти в обзорных статьях Зубарева [212] и Алексеева [5], а также в книге Каданова и Бейма [108].

§ 14. СВЕРХТЕКУЧИЕ СИСТЕМЫ

Теория функций Грина для сверхтекущих систем представляет собой слишком большой раздел, чтобы здесь можно было дать достаточно полное ее изложение. Вместо этого мы ограничимся тем, что укажем наиболее существенные элементы модификации теории нормальных систем, которые необходимо совершить в данном случае. Для этого рассмотрим (хотя и менее подробно, чем ранее) теорию одночастичного спектра, причем часто будем обращаться к результатам Беляева [16], Гугенгольца и Пайнса [101], Ларкина и Мигдала [122]. Более подробное изложение теории сверхтекущих систем читатель может найти в книгах Нозьера [156] и Абрикосова, Горькова и Дзялошинского [4].

1. Бозоны

Рассмотрим здесь модель HeII, исследованную в гл. 8, хотя ясно, что используемый при этом метод применим также для описания фононов и магнонов. Наличие макроскопически заполненного конденсата частиц с нулевым импульсом порождает дополнительную трудность, которой мы также займемся. Прежде чем приступить к этому, напомним основные результаты исследования нормальных ферми-систем, которые были получены в предыдущих параграфах настоящей главы. В частности, одночастичная функция Грина была определена так, что ее полюса давали энергетический спектр одночастичных возбуждений. Далее, для удобства вычислений пропагатор был представлен в виде суммы хронологически упорядоченных произведений, среднее значение которых вычислялось для вакуумного (относительно пары частицы — дырка) состояния. Затем была привлечена теорема Вика, которая позволяет заменить каждое среднее от T -произведения соответствующим набором хронологически спаренных произведений [что основано на свойстве матричных элементов, взятых между вакуумными состояниями; см. текст после соотношений (4.14.1)]. После этого нужно было просуммировать полученный ряд.

В случае бозонов нас, конечно, уже не беспокоит вопрос о частицах и дырках, но здесь придется пересмотреть определение вакуумного состояния, так как им уже не может быть состояние с нулевым импульсом. Действительно, из-за наличия конденсата $a_{\mathbf{k}}|0\rangle = 0$ только при $\mathbf{k} \neq 0$, поскольку величина $\langle 0 | a_0^\dagger a_0 | 0 \rangle$ равна полному числу частиц в конденсате. Следовательно, без достаточной модификации задачи такое состояние не может быть вакуумным в смысле предыдущего параграфа, так как некоторые средние от N -произведений, содержащих a_0^\dagger и a_0 , не будут равны нулю.

а) Модифицированный гамильтониан. Упомянутую выше трудность, связанную с определением вакуума, можно обойти, если перейти к описанию системы, рассматривая возбуждения из конденсата. Для этого введем новые операторы [см. соотношения (8.3.59)]

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{a_{\mathbf{k}} a_0^\dagger}{\sqrt{N_0}}, \quad A_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{a_{\mathbf{k}}^\dagger a_0}{\sqrt{N_0}} \quad (\mathbf{k} \neq 0), \quad (14.1)$$

где N_0 — среднее число частиц в конденсате. Тогда (см. гл. 8)

$$A_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{l}} - A_{\mathbf{l}} A_{\mathbf{k}} = 0 = A_{\mathbf{k}}^\dagger A_{\mathbf{l}}^\dagger - A_{\mathbf{l}}^\dagger A_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (\mathbf{l}, \mathbf{k} \neq 0), \quad (14.2)$$

$$A_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{l}}^\dagger - A_{\mathbf{l}}^\dagger A_{\mathbf{k}} = \frac{(a_0^\dagger a_0 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}} - a_1^\dagger a_{\mathbf{k}})}{N_0}. \quad (14.3)$$

Заменим теперь правую часть этого уравнения на $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{l}}$, в результате получим систему бозе-операторов. Такая замена возможна потому, что мы ограничиваемся рассмотрением основного состояния взаимодействующей системы и слабых отклонений от него (например, при введении добавочной частицы, как в теории одиночастичных функций Грина). Таким образом, можно вычислять операторы (14.3), как если бы они действовали на основное состояние, а в силу того, что (как легко убедиться) $a_0^\dagger a_0$ и H коммутируют (с точностью до $1/N$), $a_0^\dagger a_0$ можно заменить на N_0 . В этом приближении членом $a_1^\dagger a_{\mathbf{k}}$ можно пренебречь.

Для определенных таким образом бозе-операторов состояние $|0\rangle$ является вакуумом, а гамильтониан

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} \quad (14.4)$$

принимает вид

$$H = T + V, \quad V = \sum_{i=1}^8 V_i, \quad (14.5)$$

где с учетом сохранения импульса введены величины

$$T = \sum \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \quad (14.6)$$

$$V_1 = \frac{1}{2} \sum V_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} A_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} A_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}} A_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}}, \quad (14.7)$$

$$V_2 = \sqrt{N_0} \sum V_{\mathbf{k}_1} A_{\mathbf{k}_1}^{\dagger} A_{\mathbf{k}_2}^{\dagger} A_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}, \quad (14.8)$$

$$V_3 = \sqrt{N_0} \sum V_{\mathbf{k}_1} A_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2}^{\dagger} A_{\mathbf{k}_1} A_{\mathbf{k}_2}, \quad (14.9)$$

$$V_4 = \frac{N_0}{2} \sum V_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{-\mathbf{k}}, \quad (14.10)$$

$$V_5 = \frac{N_0}{2} \sum V_{\mathbf{k}} A_{-\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}, \quad (14.11)$$

$$V_6 = N_0 \sum V_0 A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{\mathbf{k}}, \quad (14.12)$$

$$V_7 = N_0 \sum V_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{\mathbf{k}}, \quad (14.13)$$

$$V_8 = \frac{N_0^2}{2} V_0; \quad (14.14)$$

суммирование всюду проводится по всем \mathbf{k}_i , причем все индексы операторов независимы. Этот результат можно просто получить, выписывая все члены гамильтониана (8.3.54) и заменяя $a_0^{\dagger} a_0$ на N_0 .

Вместе с коммутационными бозе-соотношениями выражения (14.5) – (14.14) определяют постановку задачи. Конечно, число частиц строго не сохраняется, но с помощью метода множителей Лагранжа можно добиться их сохранения в среднем. Вводя оператор числа частиц $N'_{op} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{\mathbf{k}}$, находящихся вне конденсата, приходим к гамильтониану

$$H' = H - \mu N'_{op} = T + V. \quad (14.15)$$

Теперь нужно а) решить задачу с гамильтонианом (14.15) с фиксированными N_0 и μ , а затем б) наложить условие нормировки $\langle N'_{op} \rangle = N - N_0$, чтобы получить связь между N_0 и μ . Наконец, в) необходимо решить (из энергетических соображений), какое значение N_0 фактически является оптимальным. Ниже мы дадим лишь краткое описание этапа „а“. Подробное исследование задачи интересующийся читатель может найти в работах Гугенольца и Пайса [101] и Беляева [16]. Однако мы опять получим результат теории Боголюбова (см. гл. 8) в тех случаях, когда решение вопросов „а“ – „в“ оказывается тривиальным.

Чтобы исследовать спектр возбуждений на этапе „а“, нам придется воспользоваться специальной техникой, а не методами, разработанными ранее в этой главе и в гл. 8 для ферми-систем.

В общих чертах процедура состоит в следующем. Определим N -произведение соотношением

$$N(AAA^+A \dots A^+AA^+) = A^+A^+ \dots A^+AA \dots A$$

(где теперь нет знакового множителя). Отсюда вытекает известное свойство вакуум-вакуумных средних N -произведений [см. замечание 4 после формулы (4.8.2)]. Далее, T -произведения определяются, как обычно, но без знакового множителя $(-1)^p$:

$$T[A(t_1) \dots A(t_n)] = A(t_{a_1}) \dots A(t_{a_n}) \quad (t_{a_1} > \dots > t_{a_n}). \quad (14.16)$$

Тогда свертка операторов A_1 и A_2 имеет точно такой же вид, как и ранее:

$$\overline{A_1 A_2} = \langle 0 | T(A_1 A_2) | 0 \rangle,$$

где оператору A_i соответствует время t_i . Таким образом, мы получаем теорему Вика в обычном виде. Далее, так же как и в (2.3), можно определить одночастичную функцию Грина

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = i \langle \Psi_n(0) | T(A_{kt_2} A_{kt_1}^\dagger) | \Psi_n(0) \rangle. \quad (14.17)$$

Эта функция интерпретируется точно так же, как и ранее, следовательно, нам нужно исследовать зависимость от \mathbf{k} полюсов функции $G(\mathbf{k}, \omega)$ в комплексной ω -плоскости.

б) Аномальные функции Грина. Теперь можно ввести определение двух аномальных функций Грина:

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = i \langle \Psi_n(0) | T(A_{kt_2} A_{-kt_1}) | \Psi_n(0) \rangle, \quad (14.18)$$

$$\bar{G}(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = i \langle \Psi_n(0) | T(A_{kt_2}^\dagger A_{-kt_1}^\dagger) | \Psi_n(0) \rangle; \quad (14.19)$$

для сверхтекущих систем эти функции отличны от нуля. Функцию (14.19), например, можно считать амплитудой вероятности рождения пары частиц и последующей ее аннигиляции. Возможность такого процесса обусловлена наличием в гамильтониане члена (14.11). При вычислении функции (14.17), что является нашей главной целью, можно использовать (14.18) и (14.19) в качестве вспомогательных функций.

Используя метод вычислений, основанный, как и ранее, на применении теории возмущений, получаем соотношение типа (4.18), все операторы a в котором заменены на A , а вакуумное состояние $|g\rangle$ — на $|0\rangle$. При анализе ряда теории возмущений

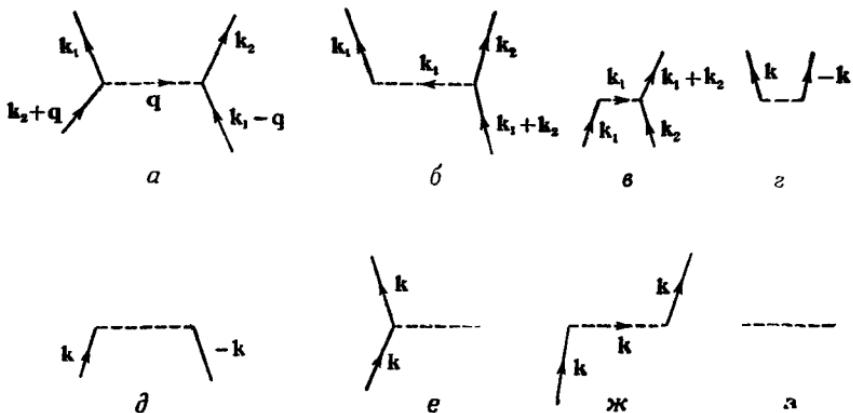
нам понадобится невозмущенная форма функции Грина (14.17), которую легко вычислить:

$$G_0(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \begin{cases} i \exp \{-i\omega_{\mathbf{k}}(t_2 - t_1)\} & (t_2 > t_1), \\ 0 & (t_1 > t_2); \end{cases} \quad (14.20)$$

здесь $\omega_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, так как мы работаем с модифицированным гамильтонианом (14.15). Фурье-образ функции (14.20) имеет вид

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = (\omega_{\mathbf{k}} - \omega - i0)^{-1}. \quad (14.21)$$

Мы видим, что G_0 совпадает с (2.11) и (2.12), если положить в них $k_f = 0$. Следовательно, если мы хотим нарисовать диаграммы, используя правила для фермионных диаграмм, то нужно



Фиг. 122.

опустить все свертки, в которых частицы движутся назад во времени и, следовательно [в силу условия (10П.6)], все свертки при одинаковом времени. Тогда в составные диаграммы будут входить изображенные на фиг. 122 элементарные структуры, соответствующие различным членам (14.7) – (14.14).

Начнем с того, что исследуем \mathfrak{D} -члены [см. (4.18)], которые в силу (14.5) можно записать в виде

$$\mathfrak{D} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt'_n \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^8 \langle 0 | T V_{i_1}(t'_1) \dots V_{i_n}(t'_n) | 0 \rangle. \quad (14.22)$$

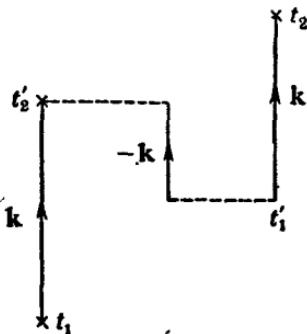
Как обычно, исследуем подынтегральное выражение. В первом приближении оно имеет вид

$$\sum_{i=1}^8 \langle 0 | T V_i(t'_1) | 0 \rangle,$$

причем в этой сумме отличен от нуля только восьмой член, соответствующий (14.14). Члены второго порядка возникают за счет суммы

$$-\sum_{i_1, i_2=1}^8 \langle 0 | T V_{i_1}(t'_1) V_{i_2}(t'_2) | 0 \rangle.$$

Здесь нужно исследовать 64 пары (i_1, i_2) , но из фиг. 122 ясно, что отличный от нуля вклад дают только диаграммы (σ, δ) и



Фиг. 123.

(z , z). Исследуя таким образом весь ряд, мы можем символически записать (14.22) в виде

$$\mathfrak{D} = 1 + \dots + \left\{ \begin{array}{c} \dots \\ \dots \end{array} \right\} + \left[\begin{array}{c} \dots \\ \dots \end{array} \right] + \dots \quad (14.23)$$

Проводя такой же анализ ряда

$$\mathfrak{N} = i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt'_n \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \sum_{i_1, \dots, i_n=1}^8 \langle 0 | T V_{i_1}(t'_1) \dots V_{i_n}(t'_n) \times A_k(t_2) A_k^\dagger(t_1) | 0 \rangle, \quad (14.24)$$

можно записать его в следующей форме:

$$\mathfrak{N} = \left\{ \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \cdots + \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \cdots + \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \cdots + \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \cdots + \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \right\} + \cdots + \left(\begin{array}{c} x \\ x \end{array} \cdots + \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \cdots + \begin{array}{c} x \\ x \end{array} \right) + \cdots, \quad (14.25)$$

Здесь, так же как и ранее, можно представить \mathfrak{N} в виде произведения и сократить один из сомножителей с \mathfrak{D} . В результате приходим к теореме о разложении по связным диаграммам:

$$\begin{aligned}
 G = \frac{\mathfrak{N}}{\mathfrak{D}} = & \\
 = & \left\{ \begin{array}{c} \times \\ \times \\ \times \end{array} + \left\{ \begin{array}{c} \times \\ \times \\ \times \end{array} \right. \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \times \\ \times \\ \times \end{array} \right. + \left\{ \begin{array}{c} \times \\ \times \\ \times \end{array} \right. + \\
 & + \left. \left\{ \begin{array}{c} \times \\ \times \\ \times \end{array} \right. \right\} + \dots \quad (14.26)
 \end{aligned}$$

Отдельные члены ряда типа (14.26) можно интерпретировать и как функции от времени и как функции от энергии.

Пример. Рассмотрим десятый член ряда (14.26) (см. также фиг. 123). Его вклад в G описывается выражением

$$i \frac{(-i)^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt'_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \langle 0 | T V_4(t'_1) V_5(t'_2) A_k(t_2) A_k^\dagger(t_1) | 0 \rangle,$$

к которому нужно добавить такой же вклад от $V_5 V_4$. В результате имеем

$$-i N_0^2 V_k^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt'_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 G_0(\mathbf{k}, t'_2 - t'_1) G_0(\mathbf{k}, t_2 - t'_1) G_0(-\mathbf{k}, t'_2 - t'_1).$$

Применяя обычный метод, т. е. заменяя $G_0(\mathbf{k}, t)$ на $G_0(\mathbf{k}, \omega)$, получаем вклад в $G(\mathbf{k}, \omega)$ в виде

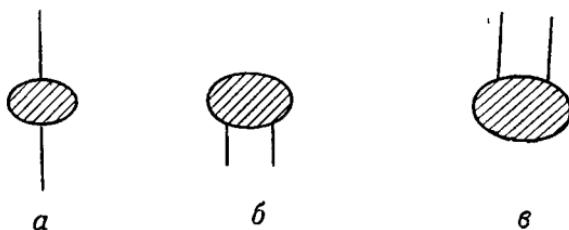
$$\begin{aligned}
 & -i N_0^2 V_k^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \{ i\omega(t_2 - t_1) \} d(t_2 - t_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt'_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt'_1 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \times \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} G_0(\mathbf{k}, \omega_1) \exp \{ -i\omega_1(t'_2 - t'_1) \} G_0(\mathbf{k}, \omega_2) \times \\
 & \times \exp \{ -i\omega_2(t_2 - t_1) \} G_0(-\mathbf{k}, \omega_3) \exp \{ -i\omega_3(t'_2 - t'_1) \} = \\
 & = -i N_0^2 V_k^2 G_0(-\mathbf{k}, -\omega) G_0^2(\mathbf{k}, \omega).
 \end{aligned}$$

Следует отметить, что если энергия ω соответствует импульсу \mathbf{k} , то энергия $-\omega$ соответствует импульсу $-\mathbf{k}$, как и следовало ожидать, рассматривая применение закона сохранения к рождению пары из вакуума.

Аналогичным способом соотношения (14.18) и (14.19) можно записать в форме, подобной (14.26). Например,

$$\tilde{G} = \begin{array}{c} \uparrow \\ \boxed{} \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \boxed{} \end{array} \cdots + \begin{array}{c} \uparrow \\ \boxed{} \end{array} + \dots \quad (14.27)$$

в) Обобщенное уравнение Дайсона. Введем теперь классификацию различных типов собственно-энергетических частей.



Фиг. 124.

Они делятся на три типа, изображенных на фиг. 124. Диаграмма фиг. 124, *a* аналогична полученной для случая нормальных ферми-систем, когда входящая частица принимает участие в некотором процессе взаимодействия, а затем покидает систему. Диаграмма на фиг. 124, *b* соответствует паре, участвующей в некотором (возможно, довольно сложном) процессе, приводящем к взаимной аннигиляции частиц пары. Простейший пример подобного процесса показан в левой части диаграммы на фиг. 123. Диаграмму типа изображенной на фиг. 124, *v* можно интерпретировать подобным образом. Структурам типа *a* можно поставить в соответствие собственно-энергетические части, используя (6.19). Аналогично собственно-энергетические части для диаграмм типов *b* и *v* можно определить с помощью (6.19), заменяя в окончательном результате G^2 на $G(\mathbf{k}, \omega) G(-\mathbf{k}, -\omega)$.

Если

$$\text{---} = \text{или } \text{---} \text{---} \text{ или } \text{---} \text{---} , \quad (14.28)$$

то о левой части говорят, что она приводима. Применяя это определение к диаграммам типа *b*, говорим, что левая часть

приводима, если

$$\text{---} = \text{или} \quad \text{---} \text{---} \text{или} \quad \text{---} \text{---} \quad , \quad (14.29)$$

в противном случае такие структуры называют неприводимыми. Так, например, диаграмма на фиг. 123 приводима, ибо она состоит из двух неприводимых частей \square и \square . Следующий шаг состоит в определении трех полных неприводимых собственно-энергетических частей M , \bar{M} и \tilde{M} , получающихся при суммировании неприводимых собственно-энергетических частей, соответствующих диаграммам типа a , b и c [что является аналогом (7.7) для данного случая]. Здесь $\bar{M} = \tilde{M}$ в силу симметрии статистики Бозе.

Теперь обобщим простое уравнение Дайсона

$$G = G_0 + G_0 M G, \quad (14.30)$$

которое является, конечно, одним из способов записи уравнения (7.8). Ясно, что уравнение (14.30) неприменимо в исследуемом случае, так как итерация не даст ни одной из диаграмм разложения (14.26), содержащей собственно-энергетическую часть типа входящей в (14.27). Отсюда ясно, что уравнение (14.30) необходимо заменить следующим уравнением:

$$G = G_0 + \tilde{G} \bar{M} G_0 + G_0 M G, \quad (14.31)$$

итерация которого дает правильный ряд теории возмущений. Проводя аналогичное исследование соотношения (14.27), получаем

$$\tilde{G} = G_0(-\mathbf{k}, -\omega) M(-\mathbf{k}, -\omega) \tilde{G} + G_0(-\mathbf{k}, -\omega) \tilde{M} G. \quad (14.32)$$

Простое алгебраическое решение уравнений (14.31) и (14.32) дает

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega + \omega_k + M(-\mathbf{k}, -\omega)}{[\omega + \omega_k + M(-\mathbf{k}, -\omega)][\omega - \omega_k - M(\mathbf{k}, \omega)] + \bar{M}\tilde{M}}, \quad (14.33)$$

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-\bar{M}}{[\omega + \omega_k + M(-\mathbf{k}, -\omega)][\omega - \omega_k - M(\mathbf{k}, \omega)] + \bar{M}\tilde{M}}. \quad (14.34)$$

Энергетический спектр одночастичных возбуждений определяется из условия обращения в нуль знаменателя в (14.33), т. е.

$$\left\{ \omega - \frac{1}{2} [M(k, \omega) - M(-k, -\omega)] \right\}^2 - \\ - \left\{ \omega_k + \frac{1}{2} [M(k, \omega) + M(-k, -\omega)] \right\}^2 + \bar{M}\tilde{M} = 0. \quad (14.35)$$

Общее исследование полученного уравнения читатель может найти в оригинальных работах. В частности, здесь требуется решить вопросы „б“ и „в“, о которых говорилось выше. Мы же ограничимся тем, что установим связь с гл. 8, получив спектр Боголюбова (8.3.74), когда решение вопросов „б“ и „в“ становится тривиальным.

В этом приближении (см. гл. 8) взаимодействие считается настолько слабым, что число частиц, возбужденных из конденсата, очень мало по сравнению с N , и поэтому можно ограничиться первым приближением по их отношению. Основным членом в энергии [см. соотношения (8.3.76) и (14.14)] является энергия статического взаимодействия N частиц. Поэтому химический потенциал μ можно найти, добавляя к системе одну частицу и вычисляя изменение энергии. В результате такого расчета, который выполняется тривиально и основан на использовании вышеназванного механизма взаимодействия, получаем (иапомним, что N_0 можно заменить на N)

$$\mu = NV_0. \quad (14.36)$$

Далее, в этом приближении [см. соответственно (14.12), (14.13) и (14.11)] имеем

$$G_0^2(k, \omega) M(k, \omega) = \left[\dots + \frac{1}{V} \dots \right] = G_0^2(k, \omega) N(V_0 + V_k), \quad (14.37)$$

$$G_0(k, \omega) G_0(-k, -\omega) \tilde{M} = \left[\dots \right] = G_0(k, \omega) G_0(-k, -\omega) NV_k. \quad (14.38)$$

Подставляя полученные соотношения в (14.35), приходим к спектру Боголюбова (8.3.74).

Одной из наиболее существенных черт такого спектра является наличие в нем фононной части. Условие существования такого спектра можно применить к (14.35). Если $\omega = 0$ при $k = 0$, то (14.35) дает

$$\mu = M(0, 0) - \tilde{M}(0, 0) \quad (14.39)$$

[неоднозначность в выборе знака устраняется путем сопоставления с результатами (14.36), (14.37) и (14.38), полученными для случая слабого взаимодействия]. Гугенгольц и Пайнс [101] доказали этот результат с помощью теории возмущений и допущения о макроскопическом заполнении конденсата. Разлагая (14.35) в ряд Тейлора, получаем для скорости звука

$$\omega'(0) = - \left(\frac{\partial \tilde{M}/\partial k}{\partial \tilde{M}/\partial \omega} \right)_{k=\omega=0},$$

что еще раз указывает на решающую роль процессов рождения и уничтожения пар в физике сверхтекущих систем.

2. Фермионы

При последовательном рассмотрении бозе-систем, воспользовавшись условием макроскопического заполнения конденсата, мы пришли к выводу о корреляции между парами $k, -k$ и разработали метод вычисления, при котором число частиц сохраняется только в среднем. Случай ферми-частиц не столь ясен. Для обычного вакуумного состояния, которое мы будем записывать как $|g\rangle_N$, чтобы подчеркнуть, что оно определено для N -частичных систем, гамильтониан будет сохранять число частиц. Однако из гл. 7 мы знаем, что для удобства математических выкладок желательно устраниТЬ условие сохранения. Чтобы разрешить эту дилемму, нужно предположить, что $|g\rangle_N$ можно заменить новым вакуумным состоянием

$$|0\rangle = \sum C_N |g\rangle_N, \quad \sum |C_N|^2 = 1, \quad (14.40)$$

где состояния под знаком суммы могут быть получены одно из другого путем добавления или изъятия пар $K, -K$; никакие другие состояния не учитываются. Точные значения весовых множителей C_N на этом этапе не определяются.

Вакуумное состояние (14.40) обладает некоторым сходством с определенным ранее, но имеется также и некоторое отличие, состоящее в том, что

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^+ = (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k)^+ \neq 0. \quad (14.41)$$

Фактически из нашего способа построения вакуумного состояния следует, что

$$\begin{aligned} \langle 0 | T a_k(t_2) a_{-k}(t_1) | 0 \rangle &= \delta_{kl} \sum C_N^* C_{N+2} \times \\ &\times [{}_N \langle g | T a_k(t_2) a_{-k}(t_1) | g \rangle_{N+2}], \end{aligned} \quad (14.42)$$

где [см. условие, введенное после (2.4)] k и l рассматриваются как индексы импульса и спина. Пока коэффициенты C неизвестны, нельзя осуществить дальнейшее упрощение формулы (14.42). Однако мы можем вычислить обычную невозмущенную функцию Грина. Так,

$$\langle 0 | T a_k(t_2) a_l^\dagger(t_1) | 0 \rangle = \delta_{kl} \sum_N |C_N|^2 \langle g | T a_k(t_2) a_k^\dagger(t_1) | g \rangle_N. \quad (14.43)$$

Это выражение есть не что иное, как сумма взятых с весовыми множителями нормальных пропагаторов свободных частиц, фурье-образы которых определяются соотношением (2.12). Следует отметить, что зависимость этих членов от k_f или, что эквивалентно, от N содержится в члене $\pm i0$. Если, как может оказаться при вычислениях, нам не нужно различать эти пределы, зависимость от N выпадает и (14.43) переходит в

$$\delta_{kl} (\omega_k - \omega)^{-1} \sum N C_N^2 = \delta_{kl} (\omega_k - \omega)^{-1}. \quad (14.44)$$

Следовательно, при вычислениях невозмущенный пропагатор имеет прежний вид. Далее метод развивается так же, как и в случае нормальных систем, за исключением того, что мы должны специально исследовать члены, входящие в модельный гамильтониан (7.4.3) (см. гл. 7). Получающийся формализм очень близок к разработанному ранее при исследовании бозесистем. Аналогом разложения (14.26), например, является

$$G = \left\{ \begin{array}{c} \text{---} \\ \times \end{array} \right\} + \dots \quad (14.45)$$

В изображенном здесь приближении этот ряд отличается от (5.2) лишь включением дополнительного десятого члена, который соответствует (фиг. 125, а) сверткам типа

$$a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M^\dagger(t_{12}) a_N^\dagger(t_{12}) a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) a_R^\dagger(t_{34}) a_S^\dagger(t_{34}) a_k^\dagger(t_2) a_k^\dagger(t_1).$$

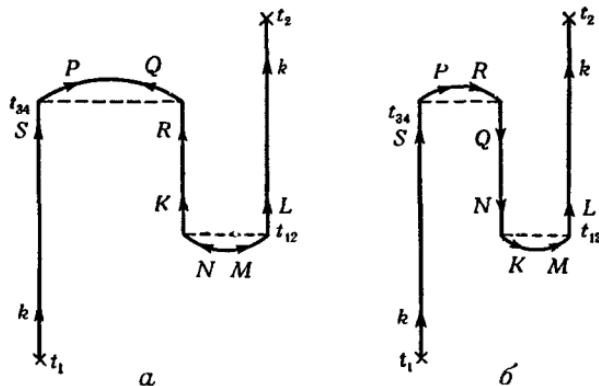
Этот член не следует путать с не дающей вклада диаграммой на фиг. 125, б.

Таким образом, мы снова приходим к соотношениям (14.31) – (14.35) с тем только отличием, что для ферми-систем $\tilde{M} = -\bar{M}$.

Чтобы установить связь с теорией БКШ, изложенной в гл. 7, исследуем случай слабого взаимодействия. В первом порядке для M имеем

$$M = M_{1d} + M_{1e}, \quad (14.46)$$

где слагаемые в правой части определяются соответственно соотношениями (6.5) и (6.8). В этом приближении M не зависит от ω . Кроме того, для разумных потенциалов взаимодействия



Ф и г. 125.

стия можно предположить, что $M(\mathbf{k}) = M(-\mathbf{k})$. Соотношение (14.46) является, очевидно, аналогом (14.37); соответственно нетрудно получить соотношение, аналогичное (14.38):

$$\tilde{M}(\mathbf{k}, \omega) = -i \sum_{\mathbf{k}'} \langle -\mathbf{k}\mathbf{k} | v | \mathbf{k}' - \mathbf{k}' \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{G}_0(\mathbf{k}', \omega') e^{i\omega' t_0}, \quad (14.47)$$

которое, как видно, в этом приближении не зависит от ω . Отсюда следует, что мы можем решить уравнение (14.35) в явном виде и получить энергетический спектр

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\omega_{\mathbf{k}} + M(\mathbf{k}))^2 + (\tilde{M}(\mathbf{k}))^2}. \quad (14.48)$$

В отличие от соотношения (14.38) для бозе-системы соотношение (14.47) не является само по себе окончательным выражением для \tilde{M} , так как интеграл в правой его части зависит через (14.42) от неизвестных коэффициентов C_N . Однако в приближении слабого взаимодействия эту трудность легко обойти.

Действительно, в этом случае $\tilde{G} \sim \tilde{G}_0$, благодаря чему (14.34) можно с помощью (14.48) представить в виде

$$\tilde{G}_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\tilde{M}(\mathbf{k})}{\omega^2 - E_{\mathbf{k}}^2}. \quad (14.49)$$

Подстановка этой функции в (14.47) сразу дает интегральное уравнение БКШ. Таким образом, мы устанавливаем связь нашего формализма с теорией БКШ, что позволяет нам по крайней мере в принципе осуществить дальнейшие уточнения этой теории.

ЗАДАЧИ

10.1. Энергетический спектр одночастичных возбуждений для гамильтониана

$$H = \sum \omega_K a_K^\dagger a_K - \frac{1}{2} \sum \Delta_K (a_K^\dagger a_{-K}^\dagger + a_{-K} a_K)$$

проще всего получить путем диагонализации с помощью преобразования Боголюбова (см. гл. 7 и 8). При этом находим точный результат

$$E_K = \sqrt{\omega_K^2 - \Delta_K \Delta_{-K}},$$

где функция Δ_K четна для бозонов и нечетна для фермионов.

Получить этот результат для бозонов с помощью метода, изложенного в § 14, п. 1, т. е. вычисляя функцию Грина в форме бесконечного ряда, который можно точно просуммировать. [Это соответствует отбрасыванию в (14.5) всех членов с потенциальной энергией, кроме V_4 и V_5 .] Более сложный пример рассмотрен в работе Маттука [148].

10.2. Формализм, развитый в § 14, п. 2, нельзя непосредственно использовать для ферми-систем, так как в нем обязательно фигурируют члены с потенциальной энергией типа $a^\dagger a^\dagger a a$. Как в таком случае можно получить правильный результат с помощью подобного метода?

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ
ДЛЯ ОДНОЧАСТИЧНЫХ ОПЕРАТОРОВ

Пусть одночастичная часть оператора Гамильтона системы N частиц имеет вид

$$U_T = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i). \quad (1\text{П.1})$$

Результат действия оператора $U(\mathbf{r}_i)$ на одночастичную базисную функцию $\Phi_l(\mathbf{r}_i)$ можно выразить через линейную комбинацию одночастичных функций $\Phi_m(\mathbf{r}_i)$, образующих полный набор

$$U(\mathbf{r}_i) \Phi_l(\mathbf{r}_i) = \sum_m \langle m | U | l \rangle \Phi_m(\mathbf{r}_i). \quad (1\text{П.2})$$

Теперь воспользуемся тем, что в общем случае N -частичный кет-вектор $|N\rangle$ можно построить путем действия N операторов рождения c^\dagger на вакуумное состояние. Следовательно, его можно записать в виде

$$|N\rangle = \prod c^\dagger |0\rangle. \quad (1\text{П.3})$$

Для бозонов, например, это будет симметризованное произведение N функций Φ_l . С помощью соотношения (1П.2) действие оператора $U(\mathbf{r}_i)$ на подобное произведение можно представить следующим образом:

$$U(\mathbf{r}_i) \prod_l \Phi_{l_j}(\mathbf{r}_i) = \sum_m \langle m | U | l_i \rangle \Phi_m(\mathbf{r}_i) \prod_{j \neq i} \Phi_{l_j}(\mathbf{r}_i). \quad (1\text{П.4})$$

Оператор U_T симметричен относительно перестановки координат частиц и поэтому коммутирует с оператором симметризации. Отсюда следует

$$\begin{aligned} U_T \underline{\prod c^\dagger |0\rangle} &= \sum_i \sum_m \langle m | U | l_i \rangle c_m^\dagger \prod_{j \neq i}^{l_j} c^\dagger |0\rangle = \\ &= \sum_{i \neq n} \sum_m \sum_n \langle m | U | n \rangle \delta_{n l_i} c_m^\dagger \prod_{j \neq i}^{l_j} c^\dagger |0\rangle, \end{aligned} \quad (1\text{П.5})$$

где \prod'^{l_i} означает произведение всех операторов c^\dagger , кроме $c_{l_i}^\dagger$.
Далее, можно показать, что

$$c_n \prod c^\dagger |0\rangle = \sum_{l_i} \delta_{l_i n} \prod'^{l_i} c^\dagger |0\rangle, \quad (1\P.6)$$

откуда для (1\P.5) получаем

$$U_T \prod c^\dagger |0\rangle = \sum_{mn} \langle m | U | n \rangle c_m^\dagger c_n \prod c^\dagger |0\rangle. \quad (1\P.7)$$

Следовательно, оператор U_T можно записать в форме

$$U_T = \sum_{mn} \langle m | U | n \rangle c_m^\dagger c_n. \quad (1\P.8)$$

Это построение было проведено для случая бозонов; для фермионов такой же результат получается при замене симметризованных произведений детерминантами.

В частности, если U — оператор кинетической энергии, то, очевидно, можно представить (1\P.8) в диагональной форме, выбирая в качестве $|m\rangle$ и $|n\rangle$ плоские волны.

Приложение II

ТЕОРЕМА ВИКА

Основная наша задача состоит в доказательстве теоремы для нормальных произведений типа (4.10.1). С помощью этой теоремы нетрудно получить теорему Вика (4.14.1) и для упорядоченного по времени произведения.

1. Теорема Вика для нормального произведения

Начнем с доказательства следующего вспомогательного утверждения:

$$N(A_1 A_2 \dots A_n)B = \sum_{r=1}^n N(A_1 A_2 \dots \underline{A_r} \dots A_n B) + N(A_1 \dots A_n B), \quad (2\P.1)$$

- а) Если B представляет собой оператор уничтожения, то все спаривания $\underline{A_r}B$ равны нулю [см. пример после определения (4.9.2)], и соотношение (2\P.1) выполняется тривиально. б) Если B — оператор рождения, а все A — также операторы рождения, то снова все спаривания $\underline{A_r}B$ равны нулю и справедливость соотношения (2\P.1) очевидна.

Следовательно, достаточно доказать (2П.1) для случая, когда B есть оператор рождения, а все A — операторы уничтожения. Тогда из „а“ и „б“ будет следовать справедливость соотношения (2П.1) и в самом общем случае. Доказательство будем проводить методом индукции.

Для рассматриваемого случая (2П.1) можно записать в виде

$$A_1 \dots A_n B = \sum_{r=1}^n (-1)^{r+n} \underline{A_r B A_1 A_2 \dots A_r \dots A_n} + (-1)^n B A_1 \dots A_n; \quad (2\text{П.2})$$

множитель $(-1)^{r+n}$ возникает из-за $(r-1)$ перестановок операторов A_r и $(n-1)$ перестановки оператора B . При $n=1$ это соотношение заведомо справедливо, в чем нетрудно убедиться с помощью (4.9.1). Теперь мы предположим, что соотношение (2П.2) справедливо, и докажем, что отсюда следует его справедливость при замене n на $n+1$. Для этого умножим (2П.2) слева на оператор уничтожения A_0 .

$$\begin{aligned} A_0 A_1 \dots A_n B &= \sum_{r=1}^n (-1)^{r+n} \underline{A_r B A_0 A_1 A_2 \dots A_r \dots A_n} + \\ &\quad + (-1)^n A_0 B A_1 \dots A_n. \end{aligned} \quad (2\text{П.3})$$

Теперь воспользуемся для преобразования последнего члена соотношением

$$A_0 B = N(A_0 B) + \underline{A_0 B} = -BA_0 + \underline{A_0 B}.$$

Возникающее при этом дополнительное спаривание можно ввести под знак суммы, если начать суммирование с $r=0$. Тогда (2П.3) принимает вид

$$\begin{aligned} A_0 A_1 \dots A_n B &= \sum_{r=0}^n (-1)^{r+n} \underline{A_r B A_0 A_1 A_2 \dots A_r \dots A_n} + \\ &\quad + (-1)^{n+1} B A_0 A_1 \dots A_n, \end{aligned}$$

или после изменения обозначений

$$\begin{aligned} A_1 A_2 \dots A_{n+1} B &= \sum_{r=1}^{(n+1)} (-1)^{r+(n+1)} \underline{A_r B A_1 A_2 \dots A_r \dots A_n} + \\ &\quad + (-1)^{n+1} B A_1 A_2 \dots A_{n+1}. \end{aligned}$$

Итак, соотношение (2П.1) доказано методом индукции.

Теперь нужно обобщить соотношение (2П.1) на случай N -произведений, содержащих спаривания. Обозначим такое

произведение с произвольным числом спариваний через

$$N(A_1 A_{\underline{2}} A_3 \dots A_x \dots A_y \dots A_z \dots A_n).$$

Тогда

$$\begin{aligned} & N(A_1 A_{\underline{2}} A_3 \dots A_x \dots A_y \dots A_z \dots A_n) B = \\ & = \Sigma N(A_1 A_{\underline{2}} A_3 \dots A_x \dots A_r \dots A_y \dots A_z \dots A_n B) + \\ & + N(A_1 A_{\underline{2}} A_3 \dots A_x \dots A_y \dots A_z \dots A_n B), \end{aligned} \quad (2\Pi.4)$$

где суммирование производится по всем пока еще не спаренным операторам A_r . Для доказательства соотношения (2Π.4) нужно вынести спаривание из-под знака N -произведения, затем применить соотношение (2Π.1), после чего возвратить все спаривания на свои места. При этом левая часть соотношения (2Π.4) сначала становится равной

$$\begin{aligned} & \pm A_{\underline{2}} A_y A_{\underline{x}} A_z \dots N(A_1 A_2 A_3 \dots A_x \dots A_y \dots A_z A_n) B = \\ & = \pm A_{\underline{2}} A_y A_{\underline{x}} A_z \dots \{ \Sigma N(A_1 A_2 \dots A_x \dots A_r \dots A_y \dots A_z \dots A_n B) + \\ & + N(A_1 A_2 \dots A_x \dots A_y \dots A_z \dots A_n B) \}. \end{aligned}$$

Возвращая спаривания под знак N -произведения, получаем правую часть соотношения (2Π.4).

Теперь перейдем к доказательству теоремы Вика для обычных произведений. Снова воспользуемся методом индукции. Как уже указывалось, при $n = 2$ теорема Вика сводится к соотношению (4.9.1). Предположим, далее, справедливость соотношения (4.10.1). Тогда нам остается доказать это соотношение для $n + 1$. Для этого умножим все члены (4.10.1) справа на оператор A_{n+1} и воспользуемся соотношением (2Π.1) и его следствием (2Π.4).

Первый член в правой части равен

$$N(A_1 A_2 \dots A_n) A_{n+1} = N(A_1 \dots A_n A_{n+1}) + \sum_r N(A_1 \dots A_r \dots A_{n+1}). \quad (2\Pi.5)$$

Следующая группа членов возникает из N -произведений, содержащих только по одному спариванию. Полный вклад чле-

нов этого типа имеет вид

$$\begin{aligned} \sum_{1 \leq x < y \leq n} N(A_1 \dots A_x \dots A_y \dots A_n) A_{n+1} = & \sum_{1 \leq x < y \leq n} N(A_1 A_2 \dots A_x \dots A_y \dots \\ & \dots A_n A_{n+1}) + \sum_{1 \leq x < y \leq n} \sum_{r+x, y} N(A_1 \dots A_x \dots A_r \dots \underline{A_y \dots A_n A_{n+1}}). \end{aligned} \quad (2\Pi.6)$$

Теперь сложим (2\Pi.5) и (2\Pi.6). Это даст член $N(A_1 \dots A_n A_{n+1})$ без спариваний. Полный вклад членов с одним спариванием можно получить, складывая второй член в правой части соотношения (2\Pi.5) с первой суммой в правой части (2\Pi.6), откуда находим

$$\sum_{1 \leq x < y \leq n+1} N(A_1 A_2 \dots A_x \dots A_y \dots A_n A_{n+1}).$$

Беря сумму (2\Pi.5) и (2\Pi.6) и добавляя все остальные вклады, получаем выражение, отличающееся от правой части (4.10.1) лишь заменой n на $n+1$. Таким образом, теорема доказана.

Справедливость теоремы не нарушается, если предположить, что операторы A_i в (4.10.1) являются линейными комбинациями операторов рождения и уничтожения (в частности, если они являются операторами ψ , ψ^\dagger , ψ_\pm и ψ_\pm^\dagger). Так, предположим, что через A_i^k обозначен (произвольно перемешанный) набор операторов рождения и уничтожения.

Тогда получаем, последовательно используя (4.10.1) и (4.9.10),

$$\begin{aligned} \left(\sum_k A_1^k \sum_l A_2^l \dots \right) &= \sum_{k, l, \dots} (A_1^k A_2^l \dots) = \\ &= \sum_{k, l, \dots} \{N(A_1^k A_2^l \dots) + N(\underline{A_1^k} \underline{A_2^l} \dots) + \dots + \underline{\dots} \} = \\ &= \sum_{k, l, \dots} N(A_1^k A_2^l \dots) + \sum_{k, l, \dots} N(\underline{A_1^k} \underline{A_2^l} \dots) + \dots + \\ &\quad + \sum_{k, l, \dots} \underline{\dots} \} = \\ &= N\left(\sum_k A_1^k \sum_l A_2^l \dots\right) + N\left(\sum_{k|l} A_1^k \sum_{l|k} A_2^l \dots\right) + \dots \end{aligned}$$

где символом $\underline{\dots}$ обозначены полностью спаренные члены. Это соотношение и представляет собой требуемый результат. Теперь можно перейти к доказательству теоремы для упорядоченного по времени (хронологического) произведения.

2. Теорема Вика для хронологического произведения

Соотношение (4.13.1) соответствует соотношению (4.14.1) для случая только двух операторов. Для T -произведений не имеет смысла доказывать теорему Вика сначала для простейших операторов A типа a , b , a^\dagger и b^\dagger (как это делалось для N -произведений), а потом уже для их линейных комбинаций. Доказательство будем проводить следующим образом.

Предположим, что порядок следования значений t_1, t_2, \dots, t_n таков, что $t_{a_1} > t_{a_2} > \dots > t_{a_n}$. Тогда T -произведение легко преобразуется в N -произведение, для которого справедливо соотношение (4.10.1).

Имеем

$$\begin{aligned} T(A_1 A_2 \dots A_n) &= \pm A_{\alpha_1} A_{\alpha_2} \dots A_{\alpha_n} = \\ &= \pm \{N(A_{\alpha_1} A_{\alpha_2} \dots A_{\alpha_n}) + N(\underline{A_{\alpha_1}} A_{\alpha_2} \dots A_{\alpha_n}) + \\ &\quad + N(A_{\alpha_1} \underline{A_{\alpha_2}} A_{\alpha_3} \dots A_{\alpha_n}) + \dots + \\ &\quad + N(A_{\alpha_1} A_{\alpha_2} \underline{A_{\alpha_3}} A_{\alpha_4} \dots A_{\alpha_n}) + \dots + \dots + \\ &\quad + \dots + \dots \}. \end{aligned} \quad (2\Pi.7)$$

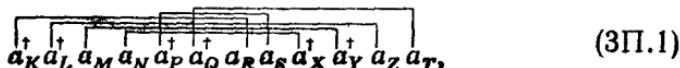
Воспользуемся теперь соотношением (4.13.3), в силу которого при нашей конкретной последовательности значений времени спаривания всюду можно заменить свертками. Производя такую замену в (2П.7) и возвращая затем каждый член на его место в соответствии с исходной последовательностью значений времени (при этом исчезают появившиеся множители ± 1), приходим к соотношению (4.14.1), которое и нужно было доказать.

Приложение III

ТЕОРЕМА О ПЕТЛЕВЫХ ДИАГРАММАХ

Доказательство этой теоремы в принципе не сложно, хотя его и трудно провести в общем виде из-за громоздкости обозначений. Поэтому начнем с того, что продемонстрируем применение этой теоремы в частном случае.

Рассмотрим произведение

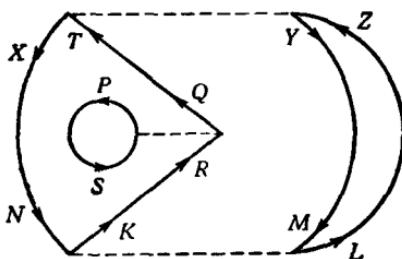


которому соответствует диаграмма на фиг. 126. Обычные временные индексы здесь опущены для того, чтобы избежать повторения. Применение теоремы к выражению (ЗП.1) распадается на два этапа.

1) Выражение (ЗП.1) можно записать в виде произведения трех множителей, соответствующих трем петлям диаграммы

$$(+1)(\overline{a_K} \overline{a_N} \overline{a_Q} \overline{a_R} \overline{a_X} \overline{a_T})(\overline{a_P} \overline{a_S})(\overline{a_L} \overline{a_M} \overline{a_Y} \overline{a_Z}). \quad (ЗП.2)$$

Взаимное расположение индексов внутри каждого сомножителя такое же, как и в (ЗП.1); кроме того, сохранены все свертки.



Фиг. 126.

По аналогии с диаграммным представлением будем называть соответствующие математические множители петлями. Множитель $(+1)$ в (ЗП.2) появляется в результате перестановок операторов из различных петель; его значение можно проверить непосредственно. (Ниже мы увидим, что это совершенно общий результат при разбиении полностью свернутого произведения на петли.)

2) Теперь воспользуемся тем, что каждую петлю можно записать в виде

$$\overline{a_K} \overline{a_N} \overline{a_Q} \overline{a_R} \overline{a_X} \overline{a_T} = - \overline{a_R} \overline{a_K} \overline{a_N} \overline{a_X} \overline{a_T} \overline{a_Q} = - \{ -i G_0(K, t_{34} - t_{12}) \delta_{KR} \} \times \\ \times \{ -i G_0(N, t_{12} - t_{56}) \delta_{NX} \} \{ -i G_0(T, t_{56} - t_{34}) \delta_{TQ} \},$$

$$\overline{a_P} \overline{a_S} = - \overline{a_S} \overline{a_P} = - \{ -i G_0(S, -0) \delta_{SP} \},$$

$$\overline{a_L} \overline{a_M} \overline{a_Y} \overline{a_Z} = - \overline{a_Z} \overline{a_L} \overline{a_M} \overline{a_Y} = - \{ -i G_0(L, t_{56} - t_{12}) \delta_{ZL} \} \times \\ \times \{ -i G_0(M, t_{12} - t_{56}) \delta_{MY} \}. \quad (ЗП.3)$$

Каждая петля дает множитель, равный произведению функций $-iG_0$ и δ -функций Кронекера, умноженному на (-1) ,

в соответствии с правилом „б“ на стр. 131. Следовательно, произведение петель (3П.2) равно умноженному на $(-1)^3$ произведению соответствующих сверток. Это доказывает правило „б“ для частного случая (3П.1), в котором $l = 3$. В общем случае будет показано, что любая петля дает дополнительный множитель -1 . С учетом сделанного выше замечания это доказывает правило „б“ и для произвольного случая.

Доказательство общего случая начнем с рассмотрения произвольного полностью свернутого члена

$$\overbrace{a_K^\dagger a_L^\dagger a_M a_N a_P^\dagger a_Q^\dagger a_R a_S \cdot a_X^\dagger a_Y^\dagger a_Z a_T}^{\text{свртк}}, \quad (3\text{П.4})$$

в котором горизонтально расположенная скобка над операторами введена для обозначения некоторого общего набора сверток всех операторов. Для удобства дальнейшего рассмотрения перепишем (3П.4) в виде

$$\overbrace{a_K^\dagger a_N a_L^\dagger a_M a_P^\dagger a_S a_Q^\dagger a_R \dots a_X^\dagger a_T a_Y^\dagger a_Z}^{\text{свртк}}, \quad (3\text{П.5})$$

где производится свертывание тех же пар, что и в (3П.4). При этом знак изменяется четное число раз (так как внутри каждого произведения четырех операторов производится две перестановки), поэтому полный множитель равен $+1$. Например, выражение (3П.1) можно записать в виде

$$\overbrace{a_K^\dagger a_N a_L^\dagger a_M a_P^\dagger a_S a_Q^\dagger a_R a_X^\dagger a_T a_Y^\dagger a_Z}^{\text{свртк}}, \quad (3\text{П.6})$$

Мы будем называть пары $a_K^\dagger a_N$, $a_L^\dagger a_M$, ..., $a_Y^\dagger a_Z$ соответственными и использовать обозначение $\overbrace{a^\dagger a}^{\text{свртк}}$ в тех случаях, когда хотим подчеркнуть, что операторы связаны соответствием.

а) Представим теперь (3П.5) в форме произведения петель, аналогичного произведению (3П.2). В каждую петлю войдут только соответственные пары. Например, если мы включаем в петлю оператор a_K^\dagger , отвечающий линии, выходящей из вершины 1, то, поскольку мы рассматриваем петлю, необходимо включить и соответственный ему оператор a_N , отвечающий линии, входящей в вершину 1. Таким образом, можно выделить любую петлю из (3П.5), последовательно исключая из полного выражения соответственные пары. В этом процессе каждая перестановка такой пары с a^\dagger или a дает множитель $(-1)^2 = +1$.

Итак, мы выделяем из (ЗП.5) петлевой сомножитель, который обязательно имеет следующую форму:

$$\boxed{a^\dagger a \underbrace{a^\dagger a \dots a^\dagger a}}, \quad (ЗП.7)$$

здесь фигурируют такие же свертки, как и в (ЗП.4) и (ЗП.5). Теперь можно заметить, что после выделения из (ЗП.5) петли (ЗП.7) оставшаяся часть представляет собой полностью свернутое произведение таких же, как в (ЗП.5), соседних соответственных пар. Поэтому процесс выделения петель можно повторять, причем снова будут появляться положительные множители (+1). В результате выражение (ЗП.4) будет представлено в форме произведения l петлевых сомножителей, каждый из которых имеет структуру выражения (ЗП.7).

б) Чтобы завершить доказательство, покажем, что в общем случае петлю (ЗП.7) можно представить в виде

$$- \overbrace{aa^\dagger aa^\dagger \dots aa^\dagger}. \quad (ЗП.8)$$

Тогда эквивалентное выражению (ЗП.4) произведение l петлевых сомножителей будет в силу правила 2 равно умноженному на $(-1)^l$ произведению множителей $-iG_0(A, t_{v\sigma} - t_{\lambda\mu})\delta_{AB}$, что и доказывает теорему.

Начнем с рассмотрения общего выражения

$$\boxed{a^\dagger a \underbrace{a^\dagger a \dots a^\dagger a_\delta}_{\dots} a^\dagger a_\alpha a^\dagger a_\beta}, \quad (ЗП.9)$$

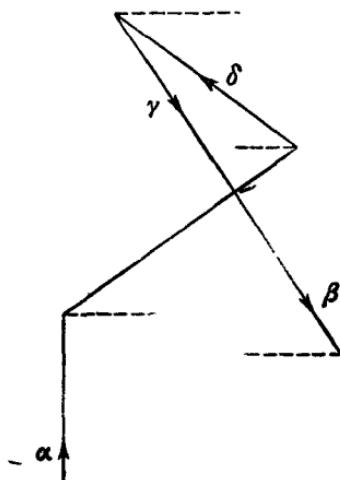
последние два оператора которого могут быть и не связаны соответствием. Если они связаны соответствием, то выражение (ЗП.9) является петлей. Типичная диаграмма, отвечающая выражению (ЗП.9), приведена на фиг. 127.

Предположим теперь (в соответствии с фиг. 127), что оператор a_β свертывается с оператором a_γ^\dagger , который связан соотношением с a_δ [см. (ЗП.9)]. Затем мы можем явно выделить $\overbrace{a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger}$ из (ЗП.9) путем четного числа перестановок и записать в виде $-\overbrace{a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger}$. После этого возникший знак минус можно скомпенсировать, переставляя оператор a_δ четным числом перестановок.

новок на место справа от a_α^\dagger , которое ранее было занято оператором a_β . При этом, конечно, оператор, связанный соотвествием с a_δ , остается прежним. Таким образом (ЗП.9) приобретает вид

$$\underbrace{(a^\dagger a a^\dagger a \dots a^\dagger a a^\dagger)}_{\alpha} \underbrace{a_\delta^\dagger a^\dagger a \dots a^\dagger a a^\dagger}_{\gamma} a_\delta^\dagger (a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger). \quad (\text{ЗП.10})$$

Графически эта операция соответствует устраниению последнего звена у диаграммы на фиг. 127. Теперь первый сомножитель



Ф и г. 127

в (ЗП.10) можно рассматривать как определение другого выражения типа (ЗП.9), к которому можно повторно применить описанный выше процесс исключения $\overline{a} \overline{a}^\dagger$, пока мы не получим произведение типа

$$\overline{a^\dagger a a a^\dagger a a^\dagger \dots a a^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger}. \quad (\text{ЗП.11})$$

В этом произведении первая свертка представляет собой все, что осталось от исходного выражения (ЗП.9). После перестановки входящих в нее операторов и соответствующего изменения знака (ЗП.11) совпадает с (ЗП.8); тем самым теорема доказана.

Приложение IV

СУММИРОВАНИЕ КОЛЬЦЕВЫХ ДИАГРАММ

Кольцевая диаграмма третьего порядка, показанная на фиг. 128, а, дает следующий вклад в корреляционную энергию:

$$E_R^{(3)} = \frac{\Omega}{2^3 \pi^3} \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \left(\frac{e^2}{q^2} \right)^3 \frac{m}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)} \frac{m}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3)}.$$

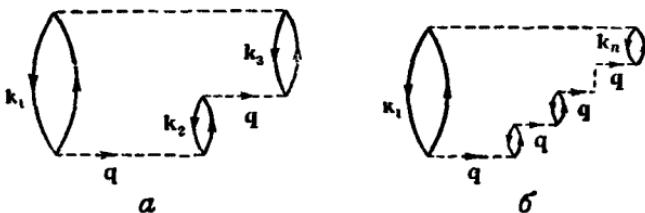
По аналогии нетрудно догадаться, что вклад изображенной на фиг. 128, б типичной кольцевой диаграммы n -го порядка имеет вид

$$\begin{aligned} E_R^{(n)} &= \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_n \\ \mathbf{q}}} \left(\frac{4}{2} \frac{v(q)}{\Omega} \right)^n \frac{-m}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)} \dots \frac{-m}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_n)} = \\ &= 2^n \left(\frac{\Omega}{8\pi^3} \right)^{n+1} (-m)^{n-1} \int d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_n d\mathbf{q} \left(\frac{v(q)}{\Omega} \right)^n \frac{1}{D_1 + D_2} \times \\ &\quad \times \frac{1}{D_1 + D_3} \dots \frac{1}{D_1 + D_n}, \end{aligned} \quad (4\Pi.1)$$

где

$$D_l(\mathbf{q}, \mathbf{k}_l) = \frac{q^2}{2} + \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}_l.$$

Фиг. 128, б представляет собой только одну из всевозможных кольцевых диаграмм n -го порядка и характеризуется тем,



Фиг. 128.

что в ней выделено дырочное состояние \mathbf{k}_1 . Вклад всех остальных кольцевых диаграмм n -го порядка будет, следовательно, равен

$$E_{R, \text{полн}}^{(n)} = 2^n \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right)^{n+1} (-m)^{n-1} \int d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_n d\mathbf{q} \left(\frac{v(q)}{\Omega} \right)^n \times$$

\times [Произведение энергетических знаменателей как в (4П.1) +
+ Сумма соответствующих произведений, возникающих из других диаграмм].

$$(4\Pi.2)$$

Чтобы выразить сумму интегралов с различными произведениями энергетических знаменателей в виде одного интеграла по \mathbf{q} , введем фейнмановский пропагатор

$$F(\mathbf{q}, t_i) = \int d\mathbf{k}_i e^{-|t_i| D_i(\mathbf{q}, \mathbf{k}_i)} \quad (4\Pi.3)$$

и определяемую с его помощью функцию

$$A_n(\mathbf{q}) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_n F(\mathbf{q}, t_1) \dots F(\mathbf{q}, t_n) \delta(t_1 + t_2 + \dots + t_n), \quad (4\Pi.4)$$

которая понадобится нам при дальнейшем изложении. Методом индукции можно доказать следующее соотношение:

$$A_n(\mathbf{q}) = 2 \int d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_n \times [\text{Сумма произведений энергетических знаменателей из (4\Pi.2)}]. \quad (4\Pi.5)$$

Мы не будем приводить здесь доказательство общего случая, а ограничимся $n=3$. Из (4\Pi.4) следует

$$\begin{aligned} A_3(\mathbf{q}) &= \frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 dt_3 F(\mathbf{q}, t_1) F(\mathbf{q}, t_2) F(\mathbf{q}, t_3) \delta(t_1 + t_2 + t_3) = \\ &= \frac{1}{3} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 e^{-D_1 |t_1|} e^{-D_2 |t_2|} e^{-D_3 |t_1 + t_2|}. \end{aligned} \quad (4\Pi.6)$$

Интеграл по времени в (4\Pi.6) можно записать в виде удвоенной суммы следующих трех интегралов:

$$\int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 e^{-D_1 t_1} e^{-D_2 t_2} e^{-D_3 (t_1 + t_2)} = \frac{1}{D_1 + D_3} \frac{1}{D_2 + D_3}, \quad (4\Pi.7)$$

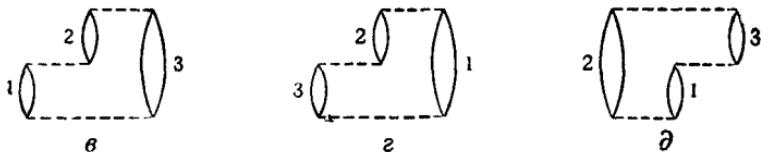
$$\int_0^{\infty} dt_1 \int_{-t_1}^0 dt_2 e^{-D_1 t_1} e^{D_2 t_2} e^{-D_3 (t_1 + t_2)} = \frac{1}{D_1 + D_3} \frac{1}{D_1 + D_2}, \quad (4\Pi.8)$$

$$\int_0^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{-t_1} dt_2 e^{-D_1 t_1} e^{D_2 t_2} e^{D_3 (t_1 + t_2)} = \frac{1}{D_1 + D_2} \frac{1}{D_2 + D_3}. \quad (4\Pi.9)$$

Энергетические знаменатели соотношений (4\Pi.7), (4\Pi.8) и (4\Pi.9) соответствуют трем кольцевым диаграммам третьего порядка

на фиг. 128, $\sigma - \delta$. Следовательно, из (4П.6) имеем

$$A_3(\mathbf{q}) = \frac{2}{3} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3 \left\{ \frac{1}{D_1 + D_2} \frac{1}{D_1 + D_3} + \frac{1}{D_1 + D_2} \frac{1}{D_2 + D_3} + \right. \\ \left. + \frac{1}{D_1 + D_3} \frac{1}{D_2 + D_3} \right\} = 2 \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3 \frac{1}{(D_1 + D_2)(D_1 + D_3)}. \quad (4П.10)$$



Фиг. 128. (Продолжение.)

С помощью (4П.5) можно записать (4П.2) в виде

$$E_{R, \text{полн}}^{(n)} = 2^n \left(\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right)^{n+1} \int d\mathbf{q} \left(\frac{v(q)}{\Omega} \right)^n A_n(q) (-m)^{n-1}. \quad (4П.11)$$

Так как

$$\delta(t_1 + \dots + t_n) = \frac{q}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{iq(t_1 + \dots + t_n)u},$$

можно представить $A_n(q)$ в виде

$$A_n(q) = \frac{q}{2\pi n} \int_{-\infty}^{\infty} [Q_q(u)]^n du, \quad (4П.12)$$

где

$$Q_q(u) = \int_{k < k_f} d\mathbf{k} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left\{ -|t| \left(\frac{q^2}{2} + \mathbf{q} \cdot \mathbf{k} \right) + iqtu \right\} = \\ = 2\pi \left[1 + \frac{1}{2q} \left(1 - \frac{1}{4} q^2 + u^2 \right) \ln \frac{(1 + q/2)^2 + u^2}{(1 - q/2)^2 + u^2} - \right. \\ \left. - u \operatorname{arctg} \frac{1 + q/2}{u} - u \operatorname{arctg} \frac{1 - q/2}{u} \right]. \quad (4П.13)$$

Нетрудно показать, что

$$\lim_{q \rightarrow 0} Q_q(u) = Q_0(u) = 4\pi \left(1 - u \operatorname{arctg} \frac{1}{u} \right). \quad (4П.14)$$

Следовательно, полный вклад в корреляционную энергию всех кольцевых диаграмм второго и более высоких порядков есть

$$\sum_{n=2}^{\infty} E_R^{(n)} \text{поли} = -\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{1}{m} \int d\mathbf{q} \frac{q}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n} [Q_q(u)]^n \left[\frac{2v(q)m}{8\pi^3} \right]^n$$

или

$$\frac{E_{\text{корр}} 2a_0}{e^2 N} = \frac{3}{16\pi^6} \int_{-\infty}^{\infty} du \int \frac{d\mathbf{q}}{q^3} \left(\frac{\pi^2 q^2}{ar_s} \right)^2 \left\{ \ln \left(1 + \frac{ar_s Q_q(u)}{\pi^2 q^2} \right) - \frac{ar_s Q_q(u)}{\pi^2 q^2} \right\}, \quad (4П. 15)$$

где последний интеграл записан в безразмерной форме, в которой q измеряется в единицах k_f , а $a^3 = 4/9\pi$.

Если интегрирование в (4П. 15) проводится с использованием Q_0 вместо Q , то получается выражение, приведенное в тексте.

Приложение V

ЗАВИСЯЩАЯ ОТ ВРЕМЕНИ ТЕОРИЯ ХАРТРИ – ФОКА ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Покажем, как можно с помощью зависящей от времени теории Хартри – Фока получить основные результаты по экранированию в электронном газе. Наше изложение довольно близко работе Эренрайха и Коэна [58].

Уравнение движения для дираковской матрицы плотности γ в не зависящей от времени формулировке (см. гл. 1) имеет вид

$$H\gamma - \gamma H = 0. \quad (5П. 1)$$

В зависящей от времени теории оно переходит в уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \gamma}{\partial t} = H\gamma - \gamma H. \quad (5П. 2)$$

Рассмотрим теперь одночастичный гамильтониан, у которого потенциальная энергия зависит от времени

$$H = T + V(\mathbf{r}, t), \quad (5П. 3)$$

где T – оператор кинетической энергии.

В основе предлагаемого метода лежит разложение дираковской матрицы в ряд:

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_1 + \dots \quad (5П. 4)$$

и представление потенциальной энергии в виде

$$V(\mathbf{r}, t) = \int V(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{k}. \quad (5П. 5)$$

Подставим (5П.4) и (5П.5) в уравнение (5П.2) и линеаризуем последнее, пренебрегая членами, содержащими произведение $\gamma_1 V$, так как предполагается, что γ_1 есть величина первого порядка по V .

Как и в не зависящей от времени теории, развитой в гл. 5, § 2, потенциал V состоит из неэкранированного взаимодействия V_0 плюс потенциал V_e электронного экранирующего облака. Последний, как обычно, связан с изменением $\Delta\rho$ плотности электронов уравнением Пуассона

$$\nabla^2 V_e = -4\pi e^2 \Delta\rho. \quad (5П.6)$$

Изменение плотности электронов выражается через матрицу плотности:

$$\Delta\rho(\mathbf{r}) = Sp(\delta(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}) \gamma_1). \quad (5П.7)$$

Вычисляя матричные элементы матрицы γ_1 между состояниями \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{q}$, получаем из (5П.2)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{k} | \gamma_1 | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle &= \\ &= \langle \mathbf{k} | [H_0, \gamma_1] | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + \langle \mathbf{k} | [V, \gamma_0] | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \\ &= (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle \mathbf{k} | \gamma_1 | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + [f_0(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(E_{\mathbf{k}})] V(\mathbf{q}, t). \end{aligned} \quad (5П.8)$$

Здесь мы произвели небольшое обобщение, введя функцию Ферми $f_0(E)$, которая, очевидно, при нулевой температуре равна единице для E , меньших энергии Ферми, и нулю в остальных случаях. Уравнение Пуассона (5П.6) дает нам, как и в гл. 5, § 2, соотношение между $V_e(\mathbf{q}, t)$ и γ_1 :

$$V_e(\mathbf{q}, t) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}' | \gamma_1 | \mathbf{k}' + \mathbf{q} \rangle. \quad (5П.9)$$

Подставляя его в (5П.8), получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{k} | \gamma_1 | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle &= (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle \mathbf{k} | \gamma_1 | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle + \\ &+ \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} [f_0(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(E_{\mathbf{k}})] \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}' | \gamma_1 | \mathbf{k}' + \mathbf{q} \rangle. \end{aligned} \quad (5П.10)$$

Воспользуемся описанным методом зависящего от времени самосогласованного поля для упрощения вычислений диэлектрической проницаемости $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$, зависящей от частоты и волнового вектора. Для этого предположим, что $V(\mathbf{q}, t)$ зависит от времени. Будем считать также, что действующее на систему внешнее поле $V_0(\mathbf{q}, t)$ зависит от времени как $e^{i\eta t} e^{i\omega t}$, где предел $\eta \rightarrow 0$ соответствует, как мы видели, адиабатическому включению взаимодействия. Очевидно, что при этом происходит

изменение распределения электронов, для описания которого удобнее воспользоваться поляризацией $\mathbf{P}(\mathbf{q}, t)$. Последняя связана с электрическим полем $\mathbf{E}(\mathbf{q}, t)$ и диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ соотношением

$$\mathbf{P}(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{4\pi} [\epsilon(\mathbf{q}, \omega) - 1] \mathbf{E}(\mathbf{q}, t), \quad (5\text{П. 11})$$

а с изменением плотности электронов — соотношением

$$\operatorname{div} \mathbf{P} = e \Delta\rho \quad (5\text{П. 12})$$

или

$$-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{P}(\mathbf{q}, t) = e \Delta\rho(\mathbf{q}, t). \quad (5\text{П. 13})$$

Электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{q}, t)$ определяется равенством

$$e\mathbf{E}(\mathbf{q}, t) = -i\mathbf{q}V(\mathbf{q}, t). \quad (5\text{П. 14})$$

Уравнение (5П. 8) легко разрешить относительно $\langle \mathbf{k} | \psi_1 | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle$, если предположить, что $\langle \mathbf{k} | \psi_1 | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle$ и $V_e(\mathbf{q}, t)$ зависят от времени так же, как $V_0(\mathbf{q}, t)$. После этого с помощью (5П. 7) можно вычислить изменение электронной плотности $\Delta\rho(\mathbf{q}, t)$ и с помощью (5П. 12) — (5П. 14) — диэлектрическую проницаемость. В результате приходим к выражению

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(E_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} - \hbar\omega + i\hbar\eta}, \quad (5\text{П. 15})$$

которое впервые было получено Линдхардом [131]. Теперь уже нетрудно показать, что при $\omega = 0$ получается такой же результат, как и при вычислении не зависящим от времени методом Хартри — Фока [см. (5.7.1)].

Приложение VI

КОММУТАТОР ГАМИЛЬТОНИАНА САВАДЫ И $d_q^\dagger(k\sigma)$

Прежде чем приступить к вычислению коммутатора $[H_s, d_q^\dagger(k\sigma)]$, отметим, что операторы d и d^\dagger подчиняются следующим коммутационным соотношениям (см. [32]):

$$[d_q(k\sigma), d_{q'}^\dagger(k'\sigma')] = \delta_{\sigma\sigma'} (\delta_{k+qk'+q'} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma'} - \delta_{kk'} a_{k'+q'\sigma}^\dagger a_{k+q\sigma}), \quad (6\text{П. 1})$$

$$[d_q(k\sigma), d_{q'}(k'\sigma')] = \delta_{\sigma\sigma'} (\delta_{k+qk'} a_{k\sigma}^\dagger a_{k'+q'\sigma} - \delta_{k'+q'k} a_{k'\sigma}^\dagger a_{k+q\sigma}). \quad (6\text{П. 2})$$

Мы утверждаем, что для наших целей можно заменить их коммутационными соотношениями бозевского типа

$$[d_q(k\sigma), d_{q'}^\dagger(k'\sigma')] = \delta_{qq'} \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (6\text{П. 3})$$

$$[d_q(k\sigma), d_{q'}(k'\sigma')] = 0. \quad (6\text{П. 4})$$

Если предположить, что соотношения (6П. 3) и (6П. 4) справедливы, то с помощью (5.4.5) (см. гл. 5) получаем

$$\begin{aligned} [V_s, d_q^+(\mathbf{K}\beta)] &= \frac{\lambda}{2N} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \sigma, \sigma'}} [A_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma) A_{\mathbf{q}}^\dagger(\mathbf{k}'\sigma'), d_q^+(\mathbf{K}\beta)] = \\ &= \frac{\lambda}{2N} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \sigma, \sigma'}} \{ [A_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma), d_q^+(\mathbf{K}\beta)] A_{\mathbf{q}}^\dagger(\mathbf{k}'\sigma') + \\ &\quad + A_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma) [A_{\mathbf{q}}^\dagger(\mathbf{k}'\sigma'), d_q^+(\mathbf{K}\beta)] \}, \end{aligned} \quad (6\text{П. 5})$$

где для краткости введено обозначение

$$A_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma) = d_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma) + d_{-\mathbf{q}}^\dagger(-\mathbf{k}\sigma). \quad (6\text{П. 6})$$

Теперь для вычисления коммутаторов в (6П. 5) воспользуемся соотношениями (6П. 3) и (6П. 4). Тогда

$$\begin{aligned} [A_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma), d_q^+(\mathbf{K}\beta)] &= \delta_{\mathbf{qQ}} \delta_{\mathbf{kK}} \delta_{\sigma\beta}, \\ [A_{\mathbf{q}}^\dagger(\mathbf{k}\sigma), d_q^+(\mathbf{K}\beta)] &= \delta_{-\mathbf{qQ}} \delta_{-\mathbf{kK}} \delta_{\sigma\beta} \end{aligned} \quad (6\text{П. 7})$$

и соотношение (6П. 5) принимает вид

$$[V_s, d_q^+(\mathbf{K})] = \frac{\lambda}{N} v(\mathbf{Q}) \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} A_{\mathbf{Q}}^\dagger(\mathbf{k}'\sigma'). \quad (6\text{П. 8})$$

Чтобы убедиться в обоснованности соотношений (6П. 3) и (6П. 4), нужно провести те же выкладки, используя точные соотношения (6П. 1) и (6П. 2). При этом ничего не изменится, пока мы не дойдем до соотношений (6П. 7). Вместо них получим

$$[A_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma), d_q^+(\mathbf{K})] = [d_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}\sigma), d_q^+(\mathbf{K})] + [d_{-\mathbf{q}}^\dagger(-\mathbf{k}\sigma), d_q^+(\mathbf{K})], \quad (6\text{П. 9})$$

$$[A_{\mathbf{q}}^\dagger(\mathbf{k}'\sigma'), d_q^+(\mathbf{K})] = [d_{\mathbf{q}}^\dagger(\mathbf{k}'\sigma'), d_q^+(\mathbf{K})] + [d_{-\mathbf{q}}^\dagger(-\mathbf{k}\sigma), d_q^+(\mathbf{K})], \quad (6\text{П. 10})$$

где коммутаторы в правой части определяются соотношениями (6П. 1) и (6П. 2). Теперь подставим (6П. 9) и (6П. 10) в (6П. 5) и вспомним, что в принципе нас интересует только действие оператора (6П. 5) на функцию Ψ — точное основное состояние системы. Заменим Ψ для малых r_s на Ψ_0 — волновую функцию невзаимодействующих частиц. Тогда результаты действия на Ψ операторов (6П. 10) и (6П. 7) отличаются друг от друга лишь членами, обращающимися в нуль при $r_s \rightarrow 0$ (напомним, что индексы импульсов, записанные в виде сумм, относятся к частицам, а записанные отдельно — к дыркам). Точно так же при действии на Ψ оператор (6П. 9) можно заменить на (6П. 7). Это и является обоснованием использования коммутационных

соотношений бозевского типа во втором члене правой части соотношения (6П. 5) в том случае, когда нас интересуют только главные члены. Подобные же рассуждения применимы и к первому члену в правой части (6П. 5). При действии оператора $A_q^+(k'\sigma')$ на Ψ различие, возникающее за счет использования коммутационных соотношений двух типов, сводится всего лишь к появлению нескольких членов порядка $(1/N)$, которыми можно пренебречь.

Из (б.4.13) в сочетании с (6П. 8) получаем искомое соотношение

$$\{H_s, d_q^+(k\sigma)\} = \omega_q(k\sigma) d_q^+(k\sigma) + \frac{\lambda}{N} v(q) \sum_{k'\sigma'} \{d_q(k'\sigma') + d_{-q}^+(-k'\sigma')\} \quad (6П. 11)$$

и сопряженное ему соотношение

$$\begin{aligned} \{H_s, d_q(k\sigma)\} = & -\omega_q(k\sigma) d_q(k\sigma) - \frac{\lambda}{N} v(q) \times \\ & \times \sum_{k'\sigma'} \{d_q^+(k'\sigma') + d_{-q}(-k'\sigma')\}. \end{aligned} \quad (6П. 12)$$

Приложение VII

ЭНЕРГИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ КВАЗИЧАСТИЦ ПРИ БОЛЬШИХ ПЛОТНОСТЯХ

Покажем, как производится вычисление в фермиевском пределе энергии возбуждения квазичастиц в приближении случайных фаз [77, 187, 171].

Следуя методу Гелл-Манна, ограничимся рассмотрением лишь таких состояний электронного газа, в которых в возбужденных состояниях находится малое число частиц v . В этом случае энергия возбуждения E записывается в виде

$$E = E_0 + \sum_{j=1}^v \{\epsilon(k_j) - \epsilon(p_j)\} + O\left(\frac{v}{N}\right). \quad (7П. 1)$$

Для свободных электронов

$$\epsilon(p_f) = \frac{p_f^2}{\alpha^2 r_s^2}, \quad \alpha = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3}, \quad (7П. 2)$$

$$\left(\frac{d\epsilon}{dp}\right)_{p=p_f} = \frac{2}{\alpha^2 r_s^2}. \quad (7П. 3)$$

Следовательно, нам нужно вычислить $(d\epsilon/dp)_{p_f}$ для системы взаимодействующих электронов при высокой плотности. Фактически, $\epsilon(p)$ есть уменьшение энергии при аннигиляции частицы с импульсом p в системе в основном состоянии. Очевидно, что здесь $p \leq 1$. Аналогично, если рассматривать рождение электрона с импульсом k ($k \geq 1$) в системе в основном состоянии, то $\epsilon(k)$ будет представлять собой увеличение энергии.

Чтобы проиллюстрировать способ вычисления этих величин, рассмотрим член второго порядка в энергии основного состояния

$$-\frac{1}{\pi^4} \int \frac{dq}{q^4} \sum_{\substack{|p_1| < 1 \\ |p_1+q| > 1}} \int d\mathbf{p}_2 \frac{1}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)}. \quad (7\P. 4)$$

Удалим теперь из системы одну частицу со спином вверх и импульсом p . Это приведет к уменьшению энергии системы, что связано со следующими четырьмя эффектами:

а) Одночастичное состояние $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}$ оказывается незанятым, поэтому его вклад следует исключить из суммы по \mathbf{p}_1 .

б) К сумме добавляется состояние с импульсом $\mathbf{p}_1 + \mathbf{q} = \mathbf{p}$.

в) и г) Подобные же вклады возникают при перестановке \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 в „а“ и „б“. Очевидно, эти вклады равны вкладам „а“ и „б“.

Следовательно, вклад этого члена в уменьшение энергии при аннигиляции частицы равен

$$-\frac{1}{\pi^4} \left\{ \int_{|p+q| > 1} \frac{dq}{q^4} \int_{\substack{|p_2| < 1 \\ |p_2+q| > 1}} d\mathbf{p}_2 \frac{1}{q^2 + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{p}_2)} - \int_{|p-q| < 1} \frac{dq}{q^4} \times \right. \\ \left. \times \int_{\substack{|p_2| < 1 \\ |p_2+q| > 1}} d\mathbf{p}_2 \frac{1}{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{p}_2)} \right\}. \quad (7\P. 5)$$

Таким же образом можно рассмотреть вклад каждого члена в энергию основного состояния. При этом нас интересует величина $(d\epsilon/dp)_{p_f}$. Для обменной энергии имеем

$$\epsilon(p) = -\frac{1}{\pi^2 ar_s} \int_{p_2 < 1} d\mathbf{p}_2 \frac{1}{(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2)^2}, \quad (7\P. 6)$$

откуда получаем при $p = p_f$

$$\left(\frac{d\epsilon}{dp} \right)_{p_f} = \frac{2}{\pi ar_s} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{2(1-x)} = \frac{1}{\pi ar_s} \int_0^2 dq \left(\frac{1-q}{q} \right); \quad (7\P. 7)$$

эта величина логарифмически расходится, что впервые было отмечено Бардином [9].

Дифференцируя (7П.5), получаем вклад этого выражения в $(d\epsilon/dp)_{p_f}$; он равен

$$-\frac{8}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{[2(1-x)]^2}. \quad (7П.8)$$

Объединяя (7П.3), (7П.7) и (7П.8), находим

$$\left(\frac{d\epsilon}{dp}\right)_{p_f} = \frac{2}{a^2 r_s^2} + \frac{2}{\pi a r_s} \int_{-1}^1 \frac{x dx}{2(1-x)} \left\{ 1 - \frac{4ar_s}{\pi} \frac{1}{2(1-x)} + \dots \right\}. \quad (7П.9)$$

Продолжая рассуждения, использованные при вычислении энергии основного состояния, можно показать, что величина в фигурных скобках в (7П.9) представляет собой первые два члена разложения выражения

$$\left[1 + \frac{4ar_s}{\pi} \frac{1}{2(1-x)} \right]^{-1}, \quad (7П.10)$$

подстановка которого в (7П.9) дает искомое соотношение

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\epsilon}{dp}\right)_{p_f} &= \frac{2}{a^2 r_s^2} + \frac{1}{\pi a r_s} \int_0^2 dq \left(\frac{1-q}{q} \right) \frac{1}{1 + (2ar_s/\pi q)} = \\ &= \frac{2}{a^2 r_s^2} + \frac{1}{\pi a r_s} \left[-2 + \left(\frac{1+2ar_s}{\pi} \right) \ln \left(\frac{(2ar_s/\pi)+2}{2ar_s/\pi} \right) \right]. \end{aligned} \quad (7П.11)$$

С помощью этого соотношения находим теплоемкость при низких температурах

$$\frac{C_v}{C_v^0} = \left[1 + \frac{ar_s}{2\pi} \left\{ -\ln r_s + \ln \left(\frac{\pi}{a} \right) - 2 \right\} \dots \right], \quad (7П.12)$$

численное значение которой равно

$$\frac{C_v}{C_v^0} = [1 + 0,083r_s(-\ln r_s - 0,203) + \dots]^{-1}. \quad (7П.13)$$

Член $r_s \ln r_s$ впервые был получен Пайнсом [162], но его метод не давал возможность вычислить следующий член разложения.

Приложение VIII

НЕКОТОРЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ,
СВЯЗАННЫЕ С ЗАКОНОМ ПОДОБИЯ*Вычисление критической температуры*

Необходимо решить уравнение (7.6.22):

$$\frac{1}{\rho V} = \int_0^{\delta} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \operatorname{th} \frac{1}{2} \beta_c \epsilon \equiv \int_0^{\beta_c \delta} \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} = F(\beta_c \delta)$$

относительно величины $\beta_c \delta$, которую мы предполагаем большой.
Если нам удастся доказать равенство

$$\exp \left[\int_0^{\beta_c \delta} \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} \right] = 1,14 \beta_c \delta \quad (\beta_c \delta \text{ велико}),$$

то из него непосредственно следует, что $e^{1/\rho V} = 1,14 \beta_c \delta$.

Следовательно, нужно доказать, что

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \frac{\exp \left[\int_0^X \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} \right]}{X} = 1,14. \quad (8\text{П. 1})$$

Доказательство. Левая часть (8П. 1), очевидно, равна

$$\begin{aligned} \lim_{X \rightarrow \infty} \frac{\exp \left[\int_0^X \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} \right]}{\exp \left[\int_1^X \frac{dx}{x} \right]} &= \lim_{X \rightarrow \infty} \left[\exp \left\{ \int_0^1 \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} + \int_1^X \frac{dx}{x} \left(\operatorname{th} \frac{x}{2} - 1 \right) \right\} \right] = \\ &= \exp \left[\int_0^1 \frac{dx}{x} \operatorname{th} \frac{x}{2} \right] \exp \left[\int_1^\infty \frac{dx}{x} \left(\operatorname{th} \frac{x}{2} - 1 \right) \right] = 1,14. \end{aligned}$$

Вывод универсальной зависимости $\Delta(\beta)/\Delta(\infty)$ от β_c/β . Напомним сначала, что

$$\Delta(\infty) = 2\delta e^{-1/\rho V}, \quad \frac{1}{\beta_c} = 1,14 \delta e^{-1/\rho V}.$$

Отсюда следует, что $\beta_c^2 = 3,08/[\Delta(\infty)]^2$. Необходимо исследовать следующее соотношение между β и Δ :

$$\frac{1}{\rho V} = \int_0^{\delta} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \beta \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2} \right].$$

Имеем

$$\frac{1}{\rho V} = \int_0^{\delta} \frac{\beta_c d\epsilon}{\sqrt{\beta_c^2 \epsilon^2 + \beta_c^2 \Delta^2}} \operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta_c} \sqrt{\beta_c^2 \epsilon^2 + \beta_c^2 \Delta^2} \right] =$$

$$= \int_0^{\beta_c \delta} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 3,08 [\Delta(\beta)/\Delta(\infty)]^2}} \operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta_c} \sqrt{x^2 + 3,08 \left(\frac{\Delta(\beta)}{\Delta(\infty)} \right)^2} \right].$$

Пусть теперь $\beta_c \delta \rightarrow \infty$ при фиксированных значениях β/β_c и $\Delta(\beta)/\Delta(\infty)$. Этот случай аналогичен рассмотренному выше, поэтому

$$e^{1/\rho V} = \exp \left\{ \int_0^{\beta_c \delta} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 3,08 [\Delta(\beta)/\Delta(\infty)]^2}} \operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta_c} \sqrt{x^2 + 3,08 \left(\frac{\Delta(\beta)}{\Delta(\infty)} \right)^2} \right] \right\} \sim$$

$$\sim \beta_c \delta \exp \left\{ \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 3,08 [\Delta(\beta)/\Delta(\infty)]^2}} \operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta_c} \sqrt{x^2 + 3,08 \left(\frac{\Delta(\beta)}{\Delta(\infty)} \right)^2} \right] \right\} \times$$

$$\times \exp \left\{ \int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 3,08 [\Delta(\beta)/\Delta(\infty)]^2}} \left(\operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta_c} \sqrt{x^2 + 3,08 \left(\frac{\Delta(\beta)}{\Delta(\infty)} \right)^2} \right] - 1 \right) \right\}.$$

Заменяя $e^{1/\rho V}$ на $1,14 \beta_c \delta$, получаем

$$\ln 1,14 = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 3,08 [\Delta(\beta)/\Delta(\infty)]^2}} \operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta_c} \sqrt{x^2 + 3,08 \left(\frac{\Delta(\beta)}{\Delta(\infty)} \right)^2} \right] +$$

$$+ \int_1^\infty \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 3,08 [\Delta(\beta)/\Delta(\infty)]^2}} \left\{ \operatorname{th} \left[\frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta_c} \sqrt{x^2 + 3,08 \left(\frac{\Delta(\beta)}{\Delta(\infty)} \right)^2} \right] - 1 \right\},$$

откуда сразу следует, что $\Delta(\beta)/\Delta(\infty)$ зависит только от β_c/β . Это и требовалось доказать.

Приложение IX

ГАМИЛЬТОНИАН ФРЕЛИХА ДЛЯ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАЙМОДЕЙСТВИЯ

Выберем исходный гамильтониан в виде

$$H' = H_{\text{эл}} + H_f + H_{\text{вз}}, \quad (9\text{П. 1})$$

где отдельные слагаемые представляют собой соответственно гамильтонианы электронов, поля и их взаимодействие.

Если $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ — продольное смещение решетки, то можно предположить, что

$$H_f = \frac{1}{2} \int (M\dot{P}^2 + Ms'^2 (\operatorname{div} \mathbf{P})^2) n d\mathbf{r}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{P} = 0, \quad (9\text{П. 2})$$

где M — масса иона решетки, n — число ионов на единицу объема, s' — скорость звука при выключенном электрон-решеточном взаимодействии.

Следуя Фрёлиху, введем комплексную функцию \mathbf{B} , связанную с \mathbf{P} соотношением

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = \operatorname{div} \mathbf{P} + \frac{i\dot{P}}{s'}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{B} = 0. \quad (9\text{П. 3})$$

В соответствии с обычными методами теории поля (см., например, книгу Гайтлера [94]) разложим \mathbf{B} по плоским волнам (V — полный объем системы)

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{w}}{w} \sum_{\mathbf{w}} \left(\frac{2\hbar}{nVMws'} \right)^{1/2} b_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}, \quad (9\text{П. 4})$$

откуда для H_f получаем

$$H_f = \frac{1}{2} nMs'^2 \int |\operatorname{div} \mathbf{B}|^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{w}} \hbar ws' (b_{\mathbf{w}}^\dagger b_{\mathbf{w}} + b_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^\dagger). \quad (9\text{П. 5})$$

Теперь, используя коммутационные соотношения для бозонов, находим

$$[b_{\mathbf{w}}, b_{\mathbf{v}}] = b_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{v}} - b_{\mathbf{v}} b_{\mathbf{w}} = 0; \quad [b_{\mathbf{w}}, b_{\mathbf{v}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{v}, \mathbf{w}}. \quad (9\text{П. 6})$$

Как уже неоднократно указывалось, электронную часть гамильтониана (9П. 1) можно записать в виде

$$H_{\text{эл}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad (9\text{П. 7})$$

где $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$, тогда как гамильтониан взаимодействия определяется соотношением

$$H_{\text{вз}} = C' \int \psi^\dagger \psi \operatorname{div} \mathbf{P} d\mathbf{r} = i \sum_{\mathbf{w}\mathbf{k}} D_{\mathbf{w}} (b_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} - b_{\mathbf{w}}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}^\dagger a_{\mathbf{k}}). \quad (9\text{П. 8})$$

Следовательно, полный гамильтониан имеет вид

$$H' = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar ws' \left(b_{\mathbf{w}}^\dagger b_{\mathbf{w}} + \frac{1}{2} \right) + i \sum_{\mathbf{w}} D_{\mathbf{w}} (b_{\mathbf{w}} \rho_{\mathbf{w}}^\dagger - b_{\mathbf{w}}^\dagger \rho_{\mathbf{w}}), \quad (9\text{П. 9})$$

где $\rho_{\mathbf{w}}$ — фурье-компоненты оператора электронной плотности:

$$\rho_{\mathbf{w}} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}^\dagger a_{\mathbf{k}} = \rho_{-\mathbf{w}}^\dagger. \quad (9\text{П. 10})$$

Каноническое преобразование гамильтониана H'

Теперь нам нужно найти такое каноническое преобразование, которое как можно полнее исключило бы член с взаимодействием.

Фрёлих для этой цели применяет унитарный оператор e^S , в котором

$$S = \sum_w S_w, \quad S_w = -\gamma_w b_w + \gamma_w^\dagger b_w^\dagger = -S_w^\dagger, \quad (9\text{П. 11})$$

где

$$\gamma_w = \sum_k \varphi(k, w) a_k^\dagger a_{k-w}, \quad \gamma_w^\dagger = \sum_k \varphi^*(k, w) a_{k-w}^\dagger a_k. \quad (9\text{П. 12})$$

Здесь параметр $\varphi(k, w)$ выбирается таким образом, чтобы член взаимодействия в преобразованном гамильтониане

$$H = e^{S^\dagger} H' e^S \quad (9\text{П. 13})$$

был как можно меньше. Фрёлих выбрал φ в виде

$$\varphi(k, w) = -\frac{-iDw}{\epsilon_{k-w} - \epsilon_k + \hbar ws} [1 - \Delta(k, w)], \quad (9\text{П. 14})$$

где

$$\Delta(k, w) \equiv \Delta^2(k, w) = \begin{cases} 1 & \text{при } (\epsilon_{k-w} - \epsilon_k + \hbar ws)^2 < \Gamma_w^2, \\ 0 & \text{при } (\epsilon_{k-w} - \epsilon_k + \hbar ws)^2 > \Gamma_w^2, \end{cases} \quad (9\text{П. 15})$$

вспомогательный параметр Γ_w введен для того, чтобы избежать расходимостей. Окончательный результат не зависит от его значения. Здесь s — перенормированная скорость звука.

В результате такого преобразования гамильтониан записывается в виде

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_w \hbar ws b_w^\dagger b_w + \sum_w \frac{1}{2} \hbar ws' + \\ + i \sum_{w, k} D_w (b_w a_k^\dagger a_{k-w} - b_w^\dagger a_{k-w}^\dagger a_k) \Delta(k, w) + H_s, \quad (9\text{П. 16})$$

где

$$H_s = -\frac{1}{2} \sum_{w, k} \frac{D_w^2 [1 + \Delta(k, w)] [1 - \Delta(q, w)]}{\epsilon_{q-w} - \epsilon_q + \hbar ws} (a_k^\dagger a_{k-w} a_{q-w}^\dagger a_q + \text{Компл. сопр.}). \quad (9\text{П. 17})$$

Укажем, что физический смысл операторов a_k и b_w в (9П. 16) отличается от того, какой они имели в исходном гамильтониане, так как здесь они описывают соответственно электроны плюс деформацию решетки и колебания ионов решетки плюс колебания электронной плотности. Но, несмотря на это, они

подчиняются тем же коммутационным соотношениям, что и раньше.

Последний член, H_s , является наиболее существенной частью гамильтониана для теории сверхпроводимости. Он представляет эффективное взаимодействие между „электронами“ через решетку. Подобная интерпретация применялась в гл. 7.

Приложение X

ПОДРОБНЫЙ ГРАФИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ОДНОЧАСТИЧНОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА

Запишем в явном виде числитель выражения (10.4.18)

$$\begin{aligned} \mathfrak{N} = i \sum_0^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{1}{2^n} \int_{-\infty}^{\infty} dt_{(2n-1)2n} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_{12} \sum_{KLMN} \langle KL | v | NM \rangle \times \\ \times \langle PQ | v | SR \rangle \dots \langle XY | v | TZ \rangle \langle g | T \{ a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) \times \\ \times a_N(t_{12}) \dots a_T(t_{(2n-1)2n}) a_X(t_2) a_k^\dagger(t_1) \} | g \rangle, \quad (10\text{П. } 1) \end{aligned}$$

где в отличие от гл. 4 мы считаем, что времена t_1 , t_2 и t_{12} независимы, а не связаны условием $t_1 = t_2 = t_{12}$. Займемся исследованием выражения

$$\begin{aligned} \langle g | T \{ a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) \dots a_X^\dagger(t_{(2n-1)2n}) \times \\ \times a_Y^\dagger(t_{(2n-1)2n}) a_Z(t_{(2n-1)2n}) a_T(t_{(2n-1)2n}) a_k(t_2) a_k^\dagger(t_1) \} | g \rangle. \quad (10\text{П. } 2) \end{aligned}$$

Как уже говорилось ранее, согласно частному случаю теоремы Вика, среднее значение любого T -произведения равно сумме всех возможных полных сверток. Этот результат будет использован здесь для систематического изучения выражения (10П. 2) во всех порядках по n . Напомним в этой связи соотношение (4.13.16) гл. 4. Совместно с (4.13.5) оно дает

$$\overline{a_K(t)} \overline{a_L^\dagger(t')} = -i G_0(K, t \leftarrow t') \delta_{KL} = -\overline{a_L^\dagger(t')} \overline{a_K(t)}, \quad (10\text{П. } 3)$$

это равенство будет широко использоваться ниже.

Следуя установившейся традиции, начнем с исследования членов низшего порядка, а уже потом перейдем к изучению общего члена разложения.

Нулевой порядок. Единственным членом такого рода является

$$\overline{a_k(t_2)} \overline{a_k^\dagger(t_1)} = -i G_0(k, t_2 - t_1). \quad (10\text{П. } 4)$$

Используя обозначения фиг. 11, представим (10П.4) в виде диаграммы на фиг. 129.

Чтобы подчеркнуть наличие концов у линий, которая начинается при t_1 и кончается при t_2 , соответствующие точки помечены крестиками. В этом ее отличие от подобных диаграмм, приведенных, например, на фиг. 11, где линии могут быть продолжены до (плюс — минус) бесконечности. Диаграммы последнего типа соответствуют несвернутым членам, которых не может быть в вакуум-вакуумных диаграммах, рассматриваемых в гл. 10.

Можно установить следующие правила диаграммного изображения выражения (10П.4). Сначала в некотором порядке отмечаются (крестиками) два момента времени t_1 и t_2 , после чего наносится направленная линия с индексом k , идущая от t_1 к t_2 . Если переставить t_1 и t_2 , то получим второе направление времени. Оба эти случая изображены на фиг. 129.

Первый порядок. В этом случае существует $3! = 6$ возможных наборов сверток, а именно

$$\begin{aligned}
 a & \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_M(t_{12}) a_N(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_k(t_2)}^{\square} a_k^\dagger(t_1) = \\
 & = (-i)^3 \delta_{KN} \delta_{LM} G_0(K, 0) G_0(M, 0) G_0(k, t_2 - t_1), \\
 b & \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_M(t_{12}) a_N(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_k(t_2)}^{\square} a_k^\dagger(t_1) = \\
 & = -(-i)^3 \delta_{KM} \delta_{LN} G_0(K, 0) G_0(L, 0) G_0(k, t_2 - t_1), \\
 c & \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_M(t_{12}) a_N(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_k(t_2)}^{\square} a_k^\dagger(t_1) = \\
 & = -(-i)^3 \delta_{KK} \delta_{LM} \delta_{NK} G_0(k, t_2 - t_{12}) G_0(L, 0) G_0(k, t_{12} - t_1), \\
 d & \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_M(t_{12}) a_N(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_k(t_2)}^{\square} a_k^\dagger(t_1) = \\
 & = (-i)^3 \delta_{KM} \delta_{LK} \delta_{NK} G_0(K, 0) G_0(k, t_2 - t_{12}) G_0(k, t_{12} - t_1), \\
 e & \overbrace{a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_M(t_{12}) a_N(t_{12})}^{\square} \overbrace{a_k(t_2)}^{\square} a_k^\dagger(t_1) = \\
 & = (-i)^3 \delta_{KK} \delta_{LN} \delta_{MK} G_0(k, t_2 - t_{12}) G_0(L, 0) G_0(k, t_{12} - t_1),
 \end{aligned} \tag{10П.5}$$

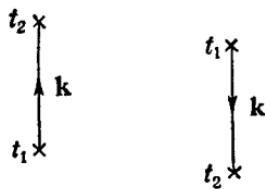
где в соответствии с рассмотрением гл. 4, § 15 пропагатор в нулевой момент времени определяют, полагая $t' = t + 0$ в (10П.3). Следовательно, всегда имеет место соотношение

$$G(k, 0) \equiv G(k, -0). \tag{10П.6}$$

Соответствующие диаграммы (при $t_2 > t_1$) приведены на фиг. 130.

Сделаем некоторые необходимые замечания.

а) Для построения диаграмм первого порядка проведем соответствующим образом индексированную пунктирную линию

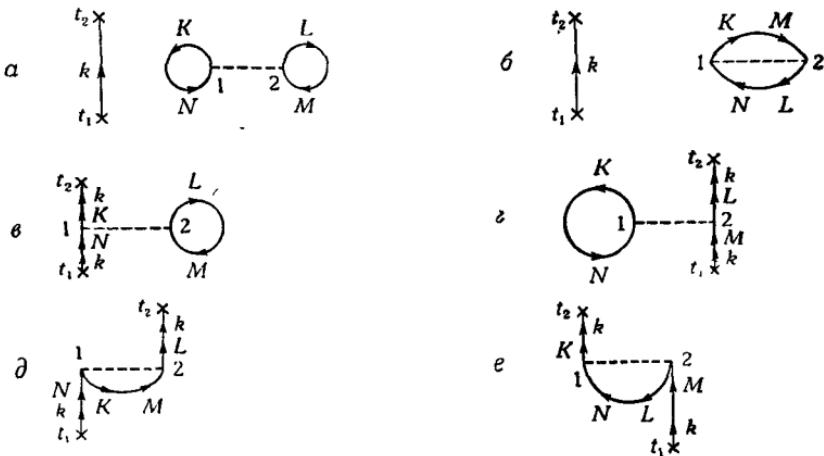


Фиг. 129. Графическое изображение соотношения (10П.4).

Соединение концов линией соответствует свертыванию. Движение частиц происходит по направлению возрастания времени, так как если $t_2 > t_1$, то функция G_0 не равна нулю при $k > k_f$ [см. (10.2, 11)]. Аналогично движение дырок происходит в направлении убывания времени. Верхнему концу диаграммы а (б) следует поставить в соответствие $a_k^+(t_2)$

$[a_k^+(t_1)]$, нижнему $a_k^-(t_1) [a_k^-(t_2)]$.

(индекс 1 слева, индекс 2 справа), относящуюся к моменту времени t_{12} , и нанесем на нее два крестика, отвечающие моментам времени t_1 и t_2 . После этого все различные диаграммы

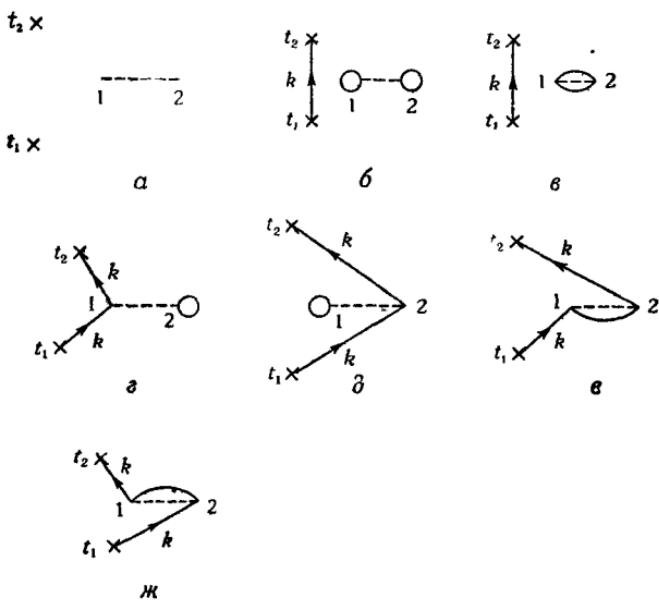


Фиг. 130.

изображаются таким образом, что одна линия начинается в t_1 , одна кончается в t_2 и в точках 1 и 2 имеется по одной входящей и выходящей линии. (Здесь еще раз используются условия гл. 4, в частности считается несущественным направление стрелок для одновременных сверток.) Нанеся индексы (индекс k

соответствует линии, выходящей из t_1 и входящей в t_2 , K и L — линиям, выходящим соответственно из 1 и 2, M и N — линиям, входящим соответственно в 2 и 1), получаем набор диаграмм первого порядка.

Для иллюстрации на фиг. 131, *a* показана скелетная структура, на которую должны наноситься линии, как изображено на диаграммах фиг. 131, *б—ж*. Полученные таким образом диаграммы совпадают с приведенными на фиг. 130.



Фиг. 131.

Если теперь мы позволим временам t_1 , t_2 и t_{12} принимать любые значения, т. е. будем считать, что крестики и горизонтальная вершина могут свободно перемещаться по плоскости, то получим все возможные значения времени у членов в выражении (10П.5). Поэтому будем считать, что каждая из диаграмм на фиг. 131 соответствует всем возможным последовательностям значений времени. Для нулевого порядка это условие означает, что необходимо изобразить только первую из двух диаграмм на фиг. 129. Далее, поскольку имеет значение только топология диаграмм, их иногда „спрятывают“, чтобы представить в наиболее компактном виде. Именно таким образом диаграммы на фиг. 130 получены из диаграмм на фиг. 131.

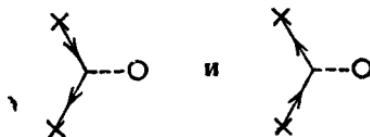
б) Из индексированной диаграммы можно, наоборот, получить соотношения (10П.5). При этом можно либо записать левые части соотношений (10П.5), явно вычисляя свертки,

либо использовать правила, согласно которым каждому отрезку с двумя индексами соответствуют δ -символ Кронекера и невозмущенная временная (для нулевого или ненулевого времени) функция Грина. Правило, позволяющее автоматически учитывать знак, который зависит от числа замкнутых петель, совпадает с приведенным в гл. 4 и вытекает из начального выбора порядка следования операторов a_{kt_1} и $a_{kt_1}^+$ в (10.2.3).

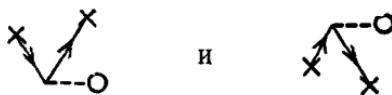
в) В теории функций Грина имеются связные и несвязные диаграммы, топологическое определение которых очевидно. Так, на фиг. 131 диаграммы б и в несвязные, а диаграммы г—ж связные. Короче говоря, мы и в этом случае получаем теорему о разложении по связным диаграммам.

Здесь также существенное значение имеют только связные диаграммы, которым можно дать простую интерпретацию. Так, диаграммы на фиг. 131, г и ж изображают движение частицы из t_1 в t_2 , которое происходит свободно, за исключением момента t_{12} , когда эта частица взаимодействует с частицей системы, а диаграммы на фиг. 131, е и жк описывают движение свободной частицы от t_1 до t_{12} , где происходит обменное взаимодействие, после чего частица продолжает свободно двигаться вплоть до момента t_2 .

г) Связные члены обращаются в нуль, если t_{12} не лежит между t_1 и t_2 . Это обусловлено тем, что вклады связных членов в (10П.5) всегда содержат множители $G_0(k, t_2 - t_{12}) G_0(k, t_{12} - t_1)$, а из (10.2.11) следует, что такое произведение равно нулю, если один из временных аргументов положителен, а другой отрицателен. Следовательно, диаграммы



дают отличный от нуля вклад, а диаграммы

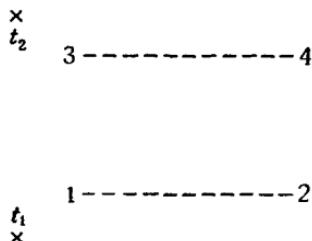


не дают вклада. Конечно, это правило представляет собой просто необходимое условие для применимости метода Фейнмана, так как две последние диаграммы нарушают правило Фейнмана, согласно которому частицы всегда движутся в положительном направлении времени, а дырки — в отрицательном.

Второй порядок. В этом случае имеется $5! = 120$ членов в разложении матричного элемента

$$\langle g | T \{ a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) a_P^\dagger(t_{34}) a_Q^\dagger(t_{34}) a_R(t_{34}) a_S(t_{34}) \times \\ \times a_k(t_2) a_k^\dagger(t_1) \} | g \rangle. \quad (10\Pi.7)$$

Ясно, что теперь неудобно выписывать все эти члены в явном виде, как это делалось в выражении первого порядка (10П.5). Тем не менее с помощью нашего метода,



Ф и г. 132.

позволяющего последовательно графически изображать свертки, нетрудно дать правила построения всех возможных диаграмм.

Будем исходить из структуры, изображенной на фиг. 132, и нанесем на нее всеми возможными способами направленные линии таким образом, чтобы одна линия выходила из t_1 , одна входила в t_2 и по одной линии входило и выходило, как обычно, из каждого конца вершинной линии. Таким путем мы получим 40 несвязных и 80 связных диаграмм. После этого можно допустить, что t_1 , t_2 , t_{12} и t_{34} могут располагаться в любой последовательности, однако с сохранением исходной топологии.

Несвязные диаграммы распадаются на две категории. К перв-

вой из них относятся 24 диаграммы типа

изображен-

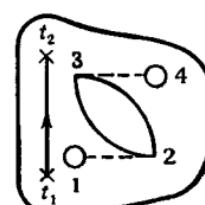
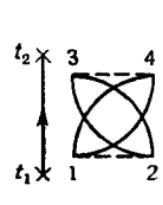
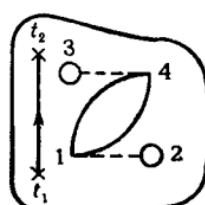
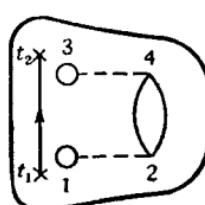
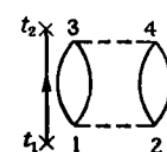
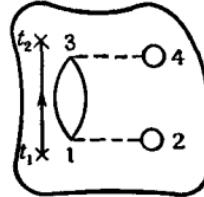
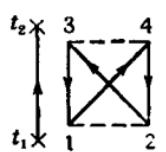
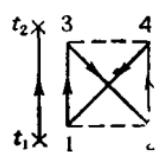
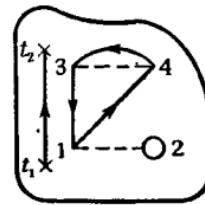
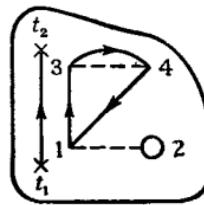
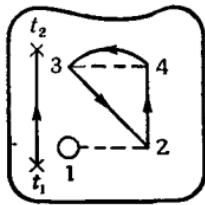
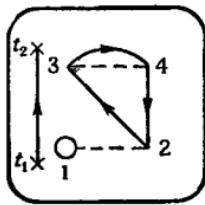
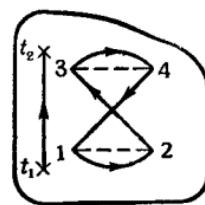
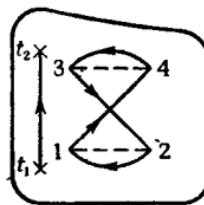
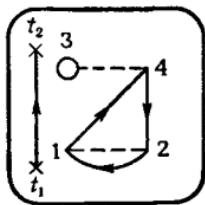
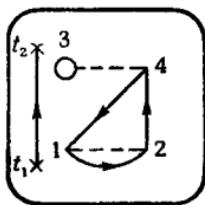
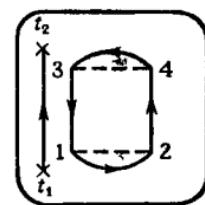
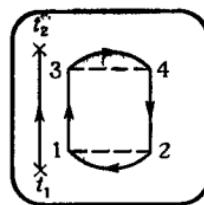
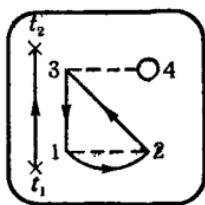
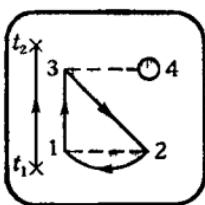
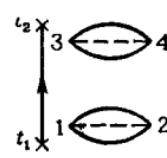
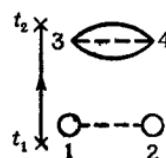
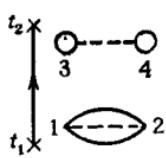
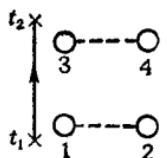
ные на фиг. 133, ко второй — 16 диаграмм типа

на

фиг. 134. Связные диаграммы (число которых равно 80) с общим видом

изображены на фиг. 135.

Нарисовав (связные и несвязные) диаграммы, приписываем одинаковый индекс k линии, выходящей из t_1 , и линии, входящей

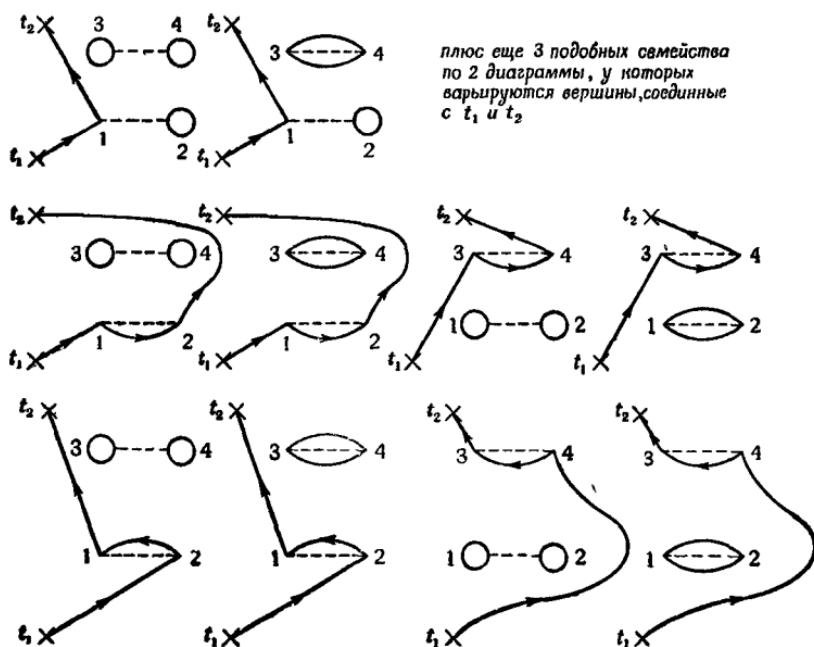


Ф и г. 133.

в t_2 . Затем обозначаются линии, входящие и выходящие из вершин (K, L — для линий, выходящих соответственно из 1 и 2, M, N — для линий, входящих соответственно в 2 и 1; P, Q — для линий, выходящих соответственно из 3 и 4; R, S — для линий, входящих соответственно в 4 и 3).

Отметим следующее:

а) Многие из этих диаграмм можно не учитывать, так как в случае взаимодействия, при котором импульс и спин сохраняются, им соответствуют матричные элементы, равные нулю.



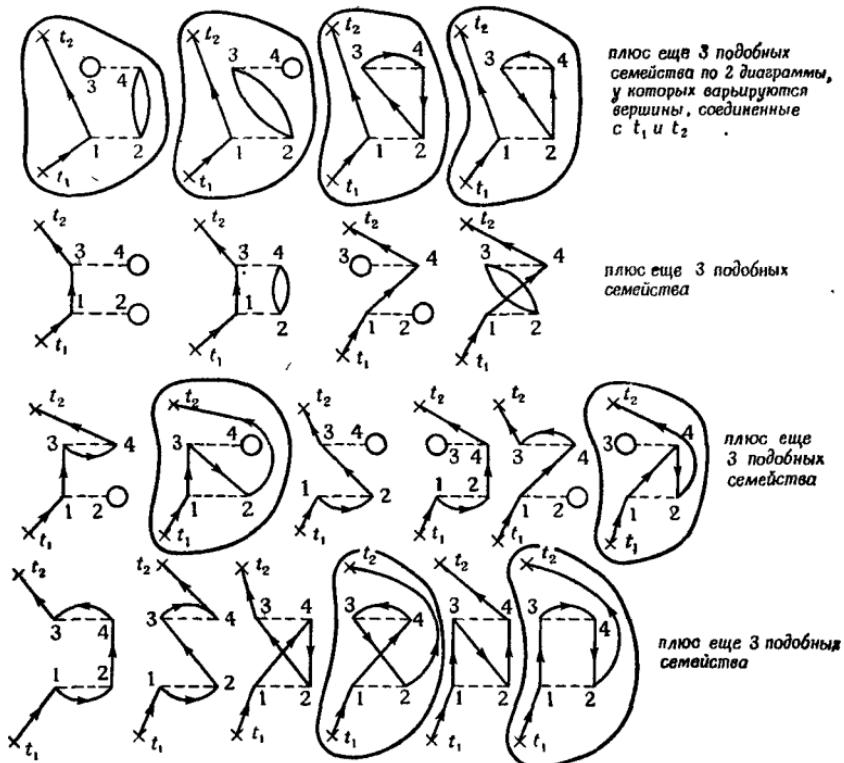
Фиг. 134.

Из гл. 4, например, нам известно (см. обсуждение фиг. 17 и фиг. 13, *е*, а также фиг. 24), что к числу таких диаграмм относятся обведенные кружком несвязные диаграммы на фиг. 133, и по тем же причинам — связные диаграммы на фиг. 135, также обведенные кружком.

б) Так же как и в случае первого порядка, диаграмма будет давать ненулевой вклад только в том случае, когда последовательность моментов времени такова, что направление линии, выходящей из t_1 , и линии, входящей в t_2 , совпадает с направлением времени. Поэтому в силу сохранения импульса обе эти линии имеют одинаковый индекс k , вследствие чего

в соответствующее выражение всегда будет входить произведение $G_0(\mathbf{k}, t_{12} - t_1) G_0(\mathbf{k}, t_2 - t_{34})$. (Напомним аналогичное замечание „г“ при обсуждении первого порядка.)

в) Как и в первом порядке, можно дать физическую интерпретацию связных диаграмм. Так, например, диаграмма на фиг. 136, а соответствует частице, порождающей из ферми-сферы пару частица — дырка, которые в дальнейшем аннигилируют

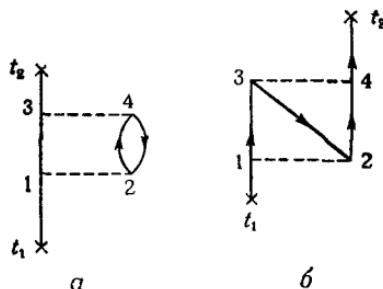


друг с другом. На диаграмме на фиг. 136, б показан процесс рождения частицей пары частица — дырка и последующая аннигиляция исходной частицы с рожденной дыркой.

г) Во втором порядке также справедливо обратное утверждение, а именно каждой диаграмме однозначно соответствует некий член выражения (10П.7). Для конкретной диаграммы можно записать либо формальное выражение, являющееся обобщением левой части соотношения (10П.5) на второй порядок, либо умножение на $(-1)^l (-i)^5$ произведение символов Кронекера и невозмущенных пропагаторов, соответствующее диа-

граммме. Здесь, как и ранее, l есть число замкнутых петель на диаграмме.

n-й порядок. После рассмотрения нулевого, первого и второго порядков для нас уже не может представлять затруднение

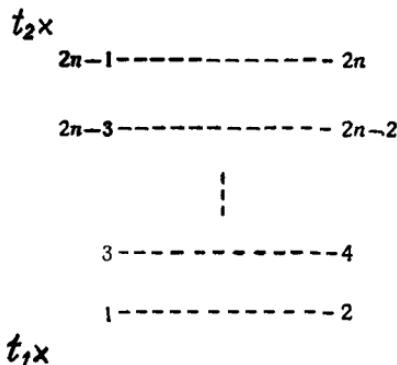


Фиг. 136.

ии изучение общего случая. Здесь разложение выражения

$$\langle g | T \{ a_K^\dagger(t_{12}) a_L^\dagger(t_{12}) a_M(t_{12}) a_N(t_{12}) a_P^\dagger(t_{34}) \dots a_X^\dagger(t_{(2n-1)2n}) a_Y^\dagger(t_{(2n-1)2n}) \times \\ \times a_Z(t_{(2n-1)2n}) a_T(t_{(2n-1)2n}) a_k(t_2) a_k^\dagger(t_1) \} | g \rangle \quad (10\text{П.8})$$

содержит $(2n+1)!$ членов, каждому из которых соответствует диаграмма, построенная следующим образом. Сначала изобра-



Фиг. 137.

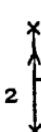
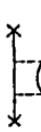
жаются линии взаимодействия, как на фиг. 137. Затем на них всеми возможными способами наносятся направленные линии, одна из которых входит в t_2 , одна выходит из t_1 и по одиой линии входит и выходит из каждой вершины. После этого

каждой вершине приписываются индексы линий: K, L, M, N – вершинам 1, 2; P, Q, R, S – вершинам 3, 4, ...; X, Y, Z, T – вершинам $2n - 1, 2n$ в определенном порядке (K, L выходят соответственно из 1 и 2, M, N входят соответственно в 2 и 1 и т. д.). Из условия сохранения импульса и спина следует, что линия, входящая в t_2 , и линия, выходящая из t_1 , имеют одинаковый индекс k .

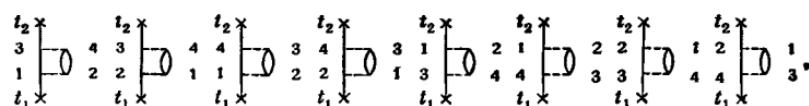
Здесь тоже можно отметить ряд моментов. а) Из условия сохранения импульса следует, что многие диаграммы дают нулевой вклад. б) Чтобы вклад диаграммы был отличен от нуля, направление линии, входящей в t_2 , и линии, выходящей из t_1 , должно совпадать с направлением времени. в) Диаграммы допускают простую физическую интерпретацию. Наконец, самое главное: г) каждой диаграмме соответствует математическое выражение, явный вид которого нетрудно получить. Каждая линия дает умноженную на δ -символ Кронекера функцию Грина свободной частицы. Эти произведения нужно перемножить, не забывая о дополнительном множителе $(-1)^l (-i)^{2n+1}$, в котором l – число замкнутых петель.

Таким образом, мы рассмотрели графический анализ выражения (10П.1), а следовательно, и (10.4.18). Возникающие при этом диаграммы распадаются на два типа: связные и несвязные. Теперь можно сразу исключить из теории несвязные диаграммы, как это было сделано в гл. 4. Дальнейшее упрощение достигается за счет введения безиндексных диаграмм, каждая из которых (n -го порядка) соответствует семейству из $2^n n!$ диаграмм, отличающихся друг от друга перестановками пар (1, 2), (3, 4), ..., ($2n - 1, 2n$) и отдельных членов внутри каждой пары. Кроме того, часто нет никакой необходимости в изображении стрелок и значений времени t_1 и t_2 . В качестве примера укажем

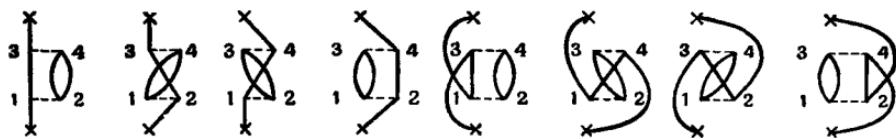
безиндексную диаграмму  , соответствующую $2^1!$ диаграммам

 , а также диаграммы  , и 

соответствующие $2^{2^2}!$ диаграммам



в которых нетрудно узнать последовательность диаграмм, изображенных на фиг. 135 в виде



Объединяя все рассмотренные члены, нетрудно понять общее выражение (10.5.1) и его символическую форму (10.5.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. Abel W. R., Anderson A. C., Wheatley J. C., Phys. Rev. Lett., **17**, 74 (1966).
2. Абрикосов А. А., ЖЭТФ, **32**, 1442 (1957); Journ. Phys. Chem. Solids, **2**, 199 (1957).
3. Абрикосов А. А., Халатников И. М., Rep. Progr. Phys., **22**, 329 (1959).
4. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., 1962.
5. Алексеев А. И., УФН, **73**, 41 (1960).
6. Anderson P. W., Phys. Rev., **112**, 1900 (1958). (См. перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
7. Anderson P. W., Journ. Phys. Chem. Solids, **11**, 26 (1959).
8. Baker G. A., Phys. Rev., **131**, 1869 (1964).
9. Bardeen J., Phys. Rev., **50**, 1098 (1936).
10. Bardeen J., Phys. Rev., **52**, 688 (1937).
11. Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R., Phys. Rev., **108**, 1175 (1957). (См. перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
12. Bardeen J., Pines D., Phys. Rev., **99**, 1140 (1955).
13. Barnett M. P., Birss F. W., Coulson C. A., Mol. Phys., **1**, 44 (1958).
14. Bell J. C., Squires E. J., Adv. Phys., **10**, 211 (1961).
15. Beliaev S. T., The Many Body Problem, Paris, 1959.
16. Беляев С. Т., ЖЭТФ, **34**, 433 (1958).
17. Bethe H. A., Phys. Rev., **138**, B804 (1965).
18. Bethe H. A., Brandow B. H., Petschek A. G., Phys. Rev., **129**, 225 (1963).
19. Blandin A., Daniel E., Freidel J., Phil Mag., **4**, 180 (1959).
20. Blatt J. M., Theory of Superconductivity, New York, 1964.
21. Beaumont C. F. A., Reekie J., Proc. Roy. Soc., **A228**, 363 (1955).
22. Bloch C., Studies in Statistical Mechanics, vol. III, Amsterdam, 1963.
23. Боголюбов Н. Н., Journ. Phys. USSR, **11**, 23 (1947).
24. Боголюбов Н. Н., ЖЭТФ, **34**, 58, 73 (1958).
25. Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н., ЖЭТФ, **28**, 129 (1955).
26. Bohm D., Pines D., Phys. Rev., **92**, 609 (1953).
27. Bohm D., Pines D., Phys. Rev., **85**, 338 (1952).
28. Bohr A., Mottelson B. R., Pines D., Phys. Rev., **110**, 936 (1958).
29. Bohm M., Huang K., Dynamical Theory of Crystal Lattices, Oxford, 1954. (См. перевод: М. Борн, Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958.)
30. Breit G., Phys. Rev., **71**, 215 (1947).
31. Brout R., Phys. Rev., **131**, 899 (1963).
32. Brout R., Carruthers P., Lectures on the Many Electron Problem, New York, 1963.
33. Brueckner K. A., Phys. Rev., **100**, 36 (1955).
34. Brueckner K. A., The Many Body Problem, Paris, 1959. (См. перевод: К. Бракнер, Теория ядерной материи, изд-во «Мир», 1964.)
35. Brueckner K. A., Gammel J. L., Phys. Rev., **109**, 1023 (1958).
36. Brueckner K. A., Goldman D. T., Phys. Rev., **117**, 207 (1960).
37. Brueckner K. A., Masterson K. S., Jr., Phys. Rev., **128**, 2267 (1962).
38. Byers N., Yang C. N., Phys. Rev. Lett., **7**, 46 (1961).
39. Carr W. J., Jr., Phys. Rev., **122**, 1437 (1961).
40. Carr W. J., Jr., Maradudin A., Phys. Rev., **133**, A371 (1964).
41. Carr W. J., Jr., Coldwell-Horsfall R. A., Fein A. E., Phys. Rev., **124**, 747 (1961).

42. Carruthers P., Rev. Mod. Phys., **33**, 921 (1961).
43. Cochran W., Rep. Progr. Phys., **26**, 1 (1963).
44. Cohen M., Feynman R. P., Phys. Rev., **107**, 13 (1957).
45. Coldwell-Horsfall R. A., Maradudin A. A., Journ. Math. Phys., **1**, 395 (1960).
46. Coldwell-Horsfall R. A., Maradudin A. A., Journ. Math. Phys., **4**, 582 (1963).
47. Cooper L. N., Phys. Rev., **104**, 1189 (1956).
48. Coulson C. A., Proc. Cambr. Phil. Soc., **34**, 204 (1938).
49. Coulson C. A., Neilson A. H., Proc. Phys. Soc., **78**, 831 (1961).
50. Daniel E., Vosko S. H., Phys. Rev., **120**, 2041 (1960).
51. de Gennes P. G., Physica, **25**, 825 (1959).
52. Dickinson W. C., Phys. Rev., **80**, 563 (1950).
53. Dirac P. A. M., Proc. Cambr. Phil. Soc., **26**, 376 (1930).
54. Dirac P. A. M., The Principles of Quantum Mechanics, Oxford, 1958. (См. перевод: П. А. М. Дирак, Принципы квантовой механики, М., 1960.)
55. Douglass D. H., Jr., Falicov L. M., Progress in Low Temperature Physics, vol. 4, Amsterdam, 1964.
56. Dubois D. F., Ann. Phys. (N. Y.), **7**, 174 (1959); **8**, 24 (1959).
57. Egelstaff P. A., Symposium on Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, Chalk River, 1963.
58. Ehrenreich H., Cohen M. H., Phys. Rev., **115**, 786 (1959).
59. Enderby J. E., Gaskell T., March N. H., Proc. Phys. Soc., **85**, 217 (1965).
60. Emery V. J., Nucl. Phys., **12**, 69 (1959).
61. Emery V. J., Sessler A. M., Phys. Rev., **119**, 248 (1960).
62. Фаддеев Л. Д., ЖЭТФ, **39**, 1459 (1960).
63. Feynman R. P., Phys. Rev., **56**, 340 (1939).
64. Feynman R. P., Phys. Rev., **91**, 1291 (1953).
65. Feynman R. P., Progress in Low Temperature Physics, vol. 1, ed. C. J. Gorter, Amsterdam, 1955.
66. Feynman R. P., Cohen M., Phys. Rev., **102**, 1189 (1956).
67. Foldy L. L., Phys. Rev., **88**, 397 (1951).
68. Foldy L. L., Phys. Rev., **124**, 649 (1961).
69. Fröhlich H., Phys. Rev., **79**, 845 (1950). (См. перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960).
70. Fuchs K., Proc. Roy. Soc., **A151**, 585 (1935).
71. Галицкий В. М., ЖЭТФ, **34**, 151 (1958).
72. Галицкий В. М., Мигдал А. Б., ЖЭТФ, **34**, 139 (1958).
73. Gammel J. L., Thaler R. M., Progress in Elementary Particle and Cosmic Ray Physics, Amsterdam, vol. 5, 1960, p. 99.
74. Garland J. W., Jr., Phys. Rev. Lett., **11**, 114 (1963).
75. Gaskell T., Proc. Phys. Soc., **77**, 1182 (1961).
76. Gaskell T., Proc. Phys. Soc., **80**, 1091 (1962).
77. Gell-Mann M., Phys. Rev., **106**, 369 (1957). (См. перевод в сб. «Проблемы современной физики», № 1, 66, 1958.)
78. Gell-Mann M., Briegenknecht K. A., Phys. Rev., **106**, 364 (1957). (См. перевод в сб. «Проблемы современной физики», № 1, 38, 1958.)
79. Gell-Mann M., Low F. E., Phys. Rev., **84**, 350 (1951).
80. Гинзбург В. Л., Ландау Л. Д., ЖЭТФ, **20**, 1064 (1950).
81. Girardeau M., Phys. Rev., **127**, 1809 (1962).
82. Glauber R. J., Phys. Rev., **98**, 1692 (1955).
83. Goldstone J., Proc. Roy. Soc., **A239**, 267 (1957). (См. перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)

84. Gombas P., Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Vienna, 1949. (См. перевод: П. Гомбаш, Статистическая теория атома и ее применение, ИЛ, 1951.)
85. Goodman B. B., IBM Journ. Res. Developm., 63 (1962).
86. Горьков Л. П., ЖЭТФ, 36, 1918 (1959).
87. Gottfried K., Picman L., Math.-phys. Meddr., 32, 13 (1960).
88. Green H. S., Journ. Chem. Phys., 20, 1274 (1952).
89. Gurnee E. F., Magee J. L., Journ. Chem. Phys., 18, 142 (1950).
90. Hall G. G., Phil. Mag., 6, 249 (1961).
91. Hall G. G., Jones L. L., Rees D., Proc. Roy. Soc., A283, 1393 (1965).
92. Hamada T., Johnston I. D., Nucl. Phys., 34, 383 (1962).
93. Hartree D. R., The Calculation of Atomic Structures, New York, 1957. (См. перевод: Д. Хартри, Расчеты атомных структур, ИЛ, 1960.)
94. Heitler W., The Quantum Theory of Radiation, Oxford, 1954. (См. перевод: В. Гейтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.)
95. Henshaw D. G., Woods A. D. B., Phys. Rev., 121, 1266 (1961).
96. Herman F., Skillman S., Atomic Structure Calculations, New Jersey, 1965.
97. Huang K., Phys. Rev., 119, 1129 (1960).
98. Huang K., Statistical Mechanics, New York, 1963. (См. перевод: К. Хуанг, Статистическая механика, изд-во «Мир», 1966.)
99. Hubbard J., Proc. Roy. Soc., A240, 539 (1957). (См. перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)
100. Hubbard J., Proc. Roy. Soc., A243, 336 (1958). (См. перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)
101. Hugenholtz N. M., Pines D., Phys. Rev., 116, 489 (1959).
102. Hugenholtz N. M., Van Hove L., Physica, 24, 363 (1958). (См. перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)
103. Ishihara A., Yee D. D. H., Phys. Rev., 136, A618 (1964).
104. Inelastic Scattering of Neutrons from Solids and Liquids, Vienna, 1963.
105. James H. M., Coolidge A. S., Phys. Rev., 55, 873 (1939).
106. Johnson M. D., Hutchinson P., March N. H., Proc. Roy. Soc., A282, 283 (1964).
107. Kadanoff L. P., Martin P. C., Ann. Phys. (N. Y.), 24, 419 (1963).
108. Kadanoff L. P., Baum G., Quantum Statistical Mechanics, New York, 1962. (См. перевод: Л. Каданов, Г. Бейм, Квантовая статистическая механика, изд-во «Мир», 1964.)
109. Kanazawa H., Watabe M., Progr. Theor. Phys., 23, 408 (1960).
110. Kanazawa H., Misawa S., Fujita E., Progr. Theor. Phys., 23, 426 (1960).
111. Kanazawa H., Matsudaira N., Progr. Theor. Phys., 23, 433 (1960).
112. Kibbly G. E., Proc. Phys. Soc., 78, 673 (1961).
113. Kittel C., Quantum Theory of Solids, New York, 1963. (См. перевод: Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, М., 1967.)
114. Klein A., Cargese Lectures in Theoretical Physics, New York, 1962.
115. Kohn W., Luttinger J. M., Phys. Rev., 118, 41 (1960).
116. Kokkedee J. J. J., Physica, 28, 893 (1962).
117. Kokkedee J. J. J., Phys. Lett., 4, 78 (1963).
118. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, 30, 1058 (1956); 32, 59 (1957).
119. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, 35, 97 (1958).
120. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, М., 1964.
121. Langer J. S., Vosko S. H., Journ. Phys. Chem. Solids, 12, 196 (1959).
122. Ларкин А. И., Мигдал А. Б., ЖЭТФ, 44, 1703 (1963).
123. Lassila K. E., Hull M. H., Jr., Ruppel H. M., McDonald F. A., Breit G., Phys. Rev., 126, 881 (1962).
124. Lee T. D., Huang K., Yang C. N., Phys. Rev., 106, 1135 (1957).

125. Lester W. A., Krauss M., Journ. Chem. Phys., **41**, 1407 (1964).
 126. Lieb E. H., Phys. Rev., **130**, 2518 (1963).
 127. Lieb E. H., Phys. Rev., **130**, 1616 (1963).
 128. Lieb E. H., Liniger W., Phys. Rev., **130**, 1605 (1963).
 129. Lieb E. H., Sakakura A. Y., Phys. Rev., **133**, A899 (1964).
 130. Lighthill M. J., Fourier Analysis and Generalized Functions, Cambridge, 1958.
 131. Lindhard J., Kgl. danske Mat. fys. Medd., **28**, 8 (1954).
 132. London F., Superfluids, vol. II, New York, 1954.
 133. London F., Superfluids, vol. I, New York, 1961.
 134. Luban M., Phys. Rev., **128**, 965 (1962).
 135. Luttinger J. M., Phys. Rev., **150**, 202 (1966).
 136. Luttinger J. M., Ward J. C., Phys. Rev., **118**, 1417 (1960).
 137. Lynton E. A., The Many Body Problem, Paris, 1959.
 138. Macke W., Zs. Naturf., **5a**, 192 (1950).
 139. March N. H., Phys. Rev., **110**, 604 (1958).
 140. March N. H., Donovan B., Proc. Phys. Soc., **67**, 464 (1954).
 141. March N. H., Murray A. M., Phys. Rev., **120**, 830 (1960).
 142. March N. H., Murray A. M., Proc. Roy. Soc., **A261**, 119 (1961).
 143. March N. H., Sampathnar S., Acta Phys. Hungarica, **14**, 61 (1962).
 144. March N. H., Young W. H., Phil. Mag., **4**, 384 (1959).
 145. Martin P. C., Schwinger J., Phys. Rev., **115**, 1342 (1959). (См. перевод: П. Мартин, Ю. Швингер, Теория систем многих частиц, ИЛ, 1958.)
 146. Maslen V. W., Proc. Phys. Soc., **A69**, 734 (1956).
 147. Mattis D. C., Theory of Magnetism, New York, 1965. (См. перевод: Д. Маттис, Теория магнетизма, изд-во «Мир», 1967.)
 148. Mattuck R. D., Ann. Phys. (N. Y.), **27**, 216 (1964).
 149. Mayer J. E., Phys. Rev., **100**, 1579 (1955).
 150. Messiah A., Quantum Mechanics, vol. I, Amsterdam, 1961.
 151. Misawa S., Phys. Rev., **140**, A1645 (1965).
 152. Montroll E. W., Ward J. C., Phys. Fluids, **1**, 55 (1958). (См. перевод в сб. «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1961.)
 153. Moravcsik M. J., The Two Nucleon Interaction, Oxford, 1963.
 154. Moszkowski S. A., Scott B. L., Ann. Phys. (N. Y.), **11**, 65 (1960).
 155. Nishen B. W., Ann. Phys. (N. Y.), **28**, 220 (1964).
 156. Nozieres P., The Theory of Interacting Fermi Systems, New York, 1963.
 157. Nozieres P., Pines D., Phys. Rev., **111**, 442 (1958).
 158. Overhauser A. W., Phys. Rev., **128**, 437 (1962).
 159. Pauling L., Podolsky B., Phys. Rev., **34**, 109 (1929).
 160. Penrose O., Onsager L., Phys. Rev., **104**, 576 (1956).
 161. Пешков В. П., ЖЭТФ, **16**, 1000 (1946).
 162. Pines D., Solid State Phys., **1**, 267 (1955).
 163. Pines D., The Many Body Problem, New York, 1961. (См. перевод: Д. Пайнс, Проблема многих тел, ИЛ, 1963.)
 164. Pippard A. B., Proc. Roy. Soc., **A216**, 547 (1953).
 165. Placzek G., Phys. Rev., **86**, 377 (1952).
 166. Prange R. E., Phys. Rev., **129**, 2495 (1963).
 167. Quinn J. J., Ferrell R. A., Phys. Rev., **112**, 812 (1958).
 168. Raimes S., The Wave Mechanics of Electrons in Metals, Amsterdam, 1961.
 169. Randolph P. D., Phys. Rev., **134**, A1238 (1964).
 170. Razavy M., Phys. Rev., **130**, 1091 (1963).
 171. Rice T. M., Ann. Phys. (N. Y.), **31**, 100 (1965).
 172. Rickayzen G., Phys. Rev., **115**, 795 (1959).

173. Rickayzen G., Theory of Superconductivity, New York, 1965.
174. Ritchie R. H., Phys. Rev., **106**, 874 (1957).
175. Roothaan C. C., Sachs L. M., Weiss A. W., Rev. Mod. Phys., **32**, 186 (1960).
176. Rosenfeld L., Theory of Electrons, Amsterdam, 1951.
177. Saint-James D., de Gennes P. G., Phys. Lett., **7**, 306 (1963).
178. Sawada K., Phys. Rev., **106**, 372 (1957). (См. перевод в сб. «Проблемы современной физики», № 1, 47, 1958.)
179. Sawada K., Bueckner K. A., Fukuda N., Brout R., Phys. Rev., **108**, 507 (1957). (См. перевод в сб. «Проблемы современной физики», № 1, 11, 1959.)
180. Schafroth M. R., Phys. Rev., **100**, 463 (1955).
181. Schafroth M. R., Solid State Phys., **10** (1960).
182. Schiff L. I., Quantum Mechanics, New York, 1955. (См. перевод: Л. Шифф, Квантовая механика, ИЛ, 1959.)
183. Schrieffer J. R., Theory of Superconductivity, New York, 1964. (См. перевод: Дж. Шриффер, Теория сверхпроводимости, М., 1969.)
184. Schwartz C., Ann. Phys. (N. Y.), **6**, 156 (1959).
185. Schweber S. S., Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, New York, 1961. (См. перевод: С. Швебер, Введение в релятивистскую квантовую теорию поля, ИЛ, 1963.)
186. Scott J. M. C., Phil. Mag., **43**, 859 (1952).
187. Silverstein S. D., Phys. Rev., **128**, 631 (1962).
188. Slater J. C., Phys. Rev., **81**, 385 (1951).
189. Slater J. C., Kirkwood J. G., Phys. Rev., **37**, 682 (1931).
190. Sommerfeld A., Zs. Phys., **78**, 283 (1932).
191. Sondheimer E. H., Wilson A. H., Proc. Roy. Soc., **A210**, 173 (1951).
192. Stephen M. J., Proc. Phys. Soc., **79**, 994 (1962).
193. Thouless D. J., Ann. Phys. (N. Y.), **10**, 553 (1960).
194. Thouless D. J., The Quantum Mechanics of Many Body Systems, New York, 1961. (См. перевод: Д. Таллес, Квантовая механика систем многих частиц, ИЛ, 1963.)
195. Tredgold R. H., Phys. Rev., **105**, 1421 (1957).
196. Ueda S., Progr. Theor. Phys., **26**, 45 (1961).
197. Valatin J. G., Nuovo Cimento, **7**, 843 (1958). (См. перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
198. Van Hove L., Phys. Rev., **95**, 249, 1374 (1954).
199. Van Hove L., Physica, **26**, S200 (1960).
200. Van Hove L., Hugenholtz N. M., Howland L. P., Quantum Theory of Many-Particle Systems, New York, 1961.
201. Vinen W. F., Proc. Roy. Soc., **A260**, 218 (1961).
202. Werner E., Nucl. Phys., **10**, 688 (1959).
203. Wigner E. P., Phys. Rev., **46**, 1002 (1934).
204. Wigner E. P., Trans. Faraday Soc., **34**, 678 (1938).
205. Wilson A. H., The Theory of Metals, Cambridge, 1958. (См. перевод 1-го изд.: А. Вильсон, Квантовая теория металлов, М., 1941.)
206. Wong D. Y., Nucl. Phys., **56**, 213 (1964).
207. Young W. H., March N. H., Phys. Rev., **109**, 1854 (1958).
208. Young W. H., March N. H., Proc. Roy. Soc., **A256**, 62 (1960).
209. Zener C., Nature, **132**, 968 (1933).
210. Ziman J. M., Electrons and Phonons, Oxford, 1960. (См. перевод: Дж. Займан, Электроны и фононы, ИЛ, 1962.)
211. Ziman J. M., Principles of the Theory of Solids, Cambridge, 1964. (См. перевод: Дж. Займан, Принципы теории твердого тела, изд-во «Мир», 1966.)
212. Зубарев Д. Н., УФН, **71**, 71 (1960).

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Адиабатическая гипотеза 92
Атомы 38
— матрица плотности одночастичная 53
— распределение электроионов по импульсам 46
— энергия связи 39
- Бардина — Купера — Шиффера волновая функция 252
— — — интегральное уравнение 260, 270
Блоха матрица плотности 21
— — — для трехмерного осциллятора 37
— уравнение 22
Боголюбова преобразование 254, 347
— спектр 348, 442
Бозе-газ заряженный 353
— идеальный 316
— твердых сфер 341
Бозе-операторы 64, 346
Бозе — Эйнштейна идеальный газ 316
— — — температура вырождения 318
— — конденсация 319
Большая статистическая сумма 358, 426
Большой канонический ансамбль 359, 422
Бравэ решетка 292
Бракнера — Гаммеля теория 226, 229
Брэгга закон рассеяния 305
- Ван Хова корреляционная функция 179, 313, 340
Ванье функции 181
Вектор состояния 64, 79
Вершина внешняя 407
Взаимодействие фонон-фононное 307
— электрон-фононное 241, 468
— электрон-электронное, энергия 178
— электрон-ядерное в атомах 44
Вигнера орбитали 182, 188
Вика теорема 107, 120, 448
- Вихрь квантованный 342
Возбуждения колективные 200, 276
— элементарные, спектр 294, 324
Волновая функция, симметрия 12
— — основного состояния, 31, 349
— — Эккарта — Хиллерааса 59
Второй звук в Не II 324, 327
Вязкость Не II 323, 327
- Гиромагнитное отношение на поверхности Ферми 194
Голдстоуна формула 90, 208, 212
Границные условия периодические 14
Грина функция, аналитическое продолжение 432
— — аномальная 375, 436
— — в представлении взаимодействия 384
— — двухчастичная 404
— — запаздывающая 377
— — одночастичная 376
— — опережающая 377
— — полюсы 381
— — спектральное представление 404
— — уравнение интегральное 431
— — уравнения движения метод 376, 428
- Дайсоиа оператор собствено-энергетический неприводимый 394
— — — для конечных температур 430
Движение коллективное 402
Дебая — Валлера фактор 305
Дебая модель 357
— температура 192
— теплоемкость 320
Дебая — Хюккеля теория 371
Диаграмма кольцевая 152, 371, 457
— лестничная 215
— обменная 161, 390
— обменной поляризации 392
— прямой поляризации 390
Диаграммы, вырождение 141
— неприводимые 396

- Диаграммы несвязные 134
 — приводимые 397
 — связные 134, 386
 — Фейнмана 98
 Дирака матрица плотности 19
 — обозначения 13
 Длина когерентности 238, 282
 Дырка 48
- Жидкий Не³ 196
- Звук нулевой 201
 — скорость 200, 312, 348
 Зоммерфельда модель 195
- Интегралы перекрытия 62
- Квазичастицы 34, 198, 378
 — взаимодействие 35
 — время жизни 202, 380
 — гамильтониан 35
 — импульс 350
 — статистика 291
 — число 200
 — энергия 196
 — эффективная масса 198
- Квантование вторичное 63
 Колебания плазменные 191, 421
 Коммутационные соотношения Бозе-65
 — — Ферми 67
 Конденсат 318, 433, 442
 — теплоемкость 320
 Координаты нормальные 292
 Корреляции статистические 61
 Кривые дисперсионные заряженного бозе-газа 355
 — — плазмонов 173
 — — фононов 294
 Куперовские пары 244, 250
- Ландау диамагнетизм 194
 Линия дырки 99
 — частицы 99
- Матрица плотности 16, 53
 — — двухчастичная 17
 — — одночастичная 17
- Матрица реакции 214
 К-матрица 223
 Мейсснера эффект 276
- Нееля температура 194
 Нейтроны, сечение рассеяния 299
- Оператор массовый 380, 394, 406
 — проекционный 27
 — рождения и уничтожения 64, 297
 Операторы полевые 71
 — — уравнение движения 426
 Осцилляции дальнодействующие 157
- Паули спиновый парамагнетизм 192
 Петли собствено-энергетические 308, 396
 Плазменные колебания (плазмоны) 421
 Поляризация неприводимая 416
 — обменная 392
 Потенциал взаимодействия, зависящий от скорости 210, 313
 — с мягкой сердцевиной 227
 — факторизующийся 228
 — химический 200, 320, 442
 Потоки квантование (в сверхпроводнике) 276
 Правила сумм 178, 423
 Представление взаимодействия 91
 — чисел заполнения 63
 Приближение гармоническое 292
 — случайных фаз 179, 309
 Произведение нормальное 101, 106
 — — среднее значение 117
 — хронологически упорядоченное 116
 Пропагатор 120, 380, 400
 — в теории ядерной материи 221
 — пары частица — дырка 369, 409
 Пропагатор фейнмановский 458
 Процессы однофононные 303
 — переброса 308
- Ротоны 325
- Савады гамильтониан, 167, 462
 Сверхпроводник, низкотемпературная теплоемкость 237
 Сверхпроводники «грязные» 278
 Сверхтекущесть 323, 327

Свободная энергия 270
 — — сверхпроводящего состояния 280
 Сжимаемость 200
 Силы ядерные 208
 Состояние вакуумное 68
 Состояния токовые 269
 Спаривание 104
 — хронологическое (свертка) 117
 Спин изотопический 233

Температура критическая сверхпроводника 274, 467
 Теорема о разложении по связанным диаграммам 132
 Теория возмущений Бриллюэна — Вигнера 28
 — — временная 91
 — — для систем многих тел 80
 — — Рэлея — Шредингера 28
 Теплоемкость электронная 191
 Томас — Ферми приближение 41, 43

Уровень энергии, сдвиг 26
 — — основного состояния 94
 Уровней пересечение 81

Фактор структурный 179, 302, 337
 Фейнмана теория жидкого He^4 330
 Ферми поверхность 15, 188
 — псевдогенциал 300
 Флуктуация плотности 176, 310, 330
 Фока пространство 64
 Фононы 292
 — дисперсионная кривая 294
 — в классических жидкостях 309
 Фугативность 359, 372
 — идеального газа 372
 Функция диэлектрическая (проницаемость) 176, 405, 420
 — — статическая 180, 374
 Функция распределения Бозе — Эйнштейна 291

Функция распределения радиальная (асимптотическая форма) 340
 — — Ферми — Дирака 272
 — спектральная 427

Хартри сумма собственных значений 43
 — — приближение 43, 400
 Хартри — Фока приближение 30, 195, 232, 400, 460

Частота столкновений 201
 Число заполнения среднее 426

Эйнштейна модель 182
 Экранирование статического заряда в электронном газе 154
 Экраинования длина 156, 164
 Электронный газ, магнитные свойства 192
 — — низкой плотности 181
 Электроны решетки 181
 — эффективное взаимодействие 471
 — — свободные, обменная энергия 62
 Энергия корреляционная в плотном электронном газе 167, 374
 — — — разреженном газе 184
 — — — отделения 231
 — — — перестройки 231
 — — — связи куперовской пары 248
 — — — молекулы водорода 57
 — — — нуклонов в ядерной материи 208
 — — — релятивистские поправки 45
 — — — тяжелых атомов 40
 Эффективная масса 198

Юкавы потенциал 210

Щель энергетическая 229, 237, 241

Ядерная материя 207

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редакторов перевода	7
Из предисловия авторов	7
Глава 1. Одночастичные приближения	9
§ 1. Введение	9
§ 2. Гамильтониан и свойства симметрии собственных функций	10
1. Бозоны (12). 2. Фермионы (12). 3. Дираковские обозначения (13).	
§ 3. Плоские волны и сфера Ферми	14
1. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов (14).	
2. Поверхность Ферми и волновое число Ферми (15).	
§ 4. Матрицы плотности	16
1. Одночастичные матрицы и плотность числа частиц (17).	
2. Двухчастичные матрицы и парная функция (17). 3. Связь между одночастичными и двухчастичными матрицами плотности. Полная энергия (18).	
§ 5. Матрица плотности Дирака	19
1. Формулы для случая плоских волн (20).	
§ 6. Матрица плотности Блоха	21
1. Уравнение Блоха (22). 2. Связь с матрицей плотности Дирака (23).	
§ 7. Теория возмущений для плоских волн	23
1. Матрица плотности Блоха (24). 2. Матрица плотности Дирака (25).	
§ 8. Теория возмущений для произвольных и невозмущенных состояний	25
1. Сдвиг уровня (26). 2. Возмущенная волновая функция (27).	
3. Теория Бриллюэна — Вигнера (28). 4. Теория Рэлея — Шредингера (28).	
§ 9. Теория Томаса — Ферми	29
§ 10. Уравнения Хартри — Фока	30
1. Одночастичный самосогласованный гамильтониан (31). 2. Физическая интерпретация уравнений Хартри — Фока (33). 3. Среднее значение гамильтониана (34).	
§ 11. Квазичастицы и элементарные возбуждения. Качественные замечания	34
Задачи	36
Глава 2. Атомы и молекулы	38
§ 1. Введение	38
§ 2. Водородоподобные атомы без учета взаимодействия между электронами	38
1. Энергия связи водородоподобных атомов (39).	

§ 3. Приближенный расчет энергии связи тяжелых атомов	40
1. Результаты Хартри для потенциала, созданного электронным облаком на ядре (44).	
§ 4. Распределение электронов по импульсам в атоме	46
§ 5. Фермиевские и корреляционные дырки в атомах	47
1. Фермиевская дырка (47). 2. Корреляционная дырка (48).	
§ 6. Вычисление одночастичной матрицы плотности для изоэлектронных гелиоподобных ионов по теории возмущений	53
§ 7. Корреляция электронов в молекуле водорода	55
1. Плотность распределения заряда в молекуле H_2 (57).	
2. Плотность распределения по импульсам (59). 3. Распределение вероятности для расстояния между электронами (60).	
Задачи	62
Глава 3. Вторичное квантование	63
§ 1. Введение	63
§ 2. Представление чисел заполнения	63
§ 3. Операторы рождения и уничтожения	64
1. Бозоны (64). 2. Фермионы (65).	
§ 4. Оператор числа частиц	68
§ 5. Вакуумное состояние	68
§ 6. Операторы в представлении вторичного квантования	70
§ 7. Полевые операторы	71
§ 8. Стационарная теория Хартрия — Фока	72
1. Недиагональная форма гамильтониана (72).	
§ 9. Описание фермионов как частиц — дырок	75
Задачи	78
Глава 4. Теория возмущений для системы многих тел	80
§ 1. Введение	80
§ 2. Теория возмущений Бриллюэна — Вигнера	82
1. Возмущения энергия (82). 2. Волновая функция (84).	
§ 3. Теория возмущений Рэлея — Шредингера	85
1. Возмущения энергия (85). 2. Волновая функция (87).	
3. Диаграммы (89).	
§ 4. Временная теория возмущений	91
§ 5. Адиабатическая гипотеза	92
§ 6. Предварительное обсуждение диаграмм для матрицы U	94
§ 7. Времениой формализм в представлении частиц — дырок	97
1. Правила для диаграмм Фейнмана (98). 2. Свойства операторов, зависящих от времени (100).	
§ 8. Нормальные произведения	101
§ 9. Спаривания	104
1. Примеры (105). 2. Нормальные произведения, содержащие спаривания (106).	
§ 10. Теорема Вика для простых произведений	107
§ 11. Первый порядок теории возмущений	109
1. Графическое представление (110).	
§ 12. Хронологически упорядоченные произведения	116
§ 13. Хронологические спаривания	117
1. Примеры хронологических спариваний операторов (119).	
§ 14. Теорема Вика для хронологических произведений	120
§ 15. Второй и более высокие порядки теорий возмущений	121
1. Правила для диаграмм первого порядка (124). 2. Диаграммы второго порядка (126). 3. Диаграммы n -го порядка (130).	

§ 16. Теорема о разложении по связанным диаграммам	132
1. Формулировка теоремы (135). 2. Доказательство (136). 3. Вы- рождение диаграмм (141).	
§ 17. Интегрирование по времени	145
Задачи	153
Глава 5. Ферми-жидкость	154
§ 1. Введение	154
§ 2. Физическое описание экранирования в однородном электрон- ном газе	154
1. Фурье-компоненты экранированного взаимодействия (156).	
§ 3. Вычисление энергии основного состояния по Гелл-Мани и Бракнеру	158
1. Константа связи (158). 2. Формализм вторичного кванто- вания (159). 3. Вычисления в первом порядке (160). 4. Члены второго порядка (161). 5. Вклады третьего порядка (165).	
§ 4. Гамильтониан Савады	167
1. Эффективная потенциальная энергия при высокой плотно- сти (167). 2. Элементарные возбуждения (171). 3. Плазменные колебания (173).	
§ 5. Диэлектрическая функция ферми-газа высокой плотности . . .	176
1. Свойства диэлектрической функции (178). 2. Энергия элек- трон-электронного взаимодействия и правила сумм (178).	
§ 6. Корреляционная функция Ван Хова	179
§ 7. Связь с теорией электронного газа высокой плотности	180
§ 8. Электронный газ низкой плотности	181
1. Осцилляторные волновые функции (орбитали Вигнера) и полная энергия (182).	
§ 9. Случай промежуточных плотностей	183
§ 10. Зависимость парной корреляционной функции и функции распределения по импульсам от плотности газа	186
1. Функция распределения по импульсам (187). 2. Смысл по- верхности Ферми (188). 3. Парная корреляционная функция (189).	
§ 11. Термодинамические свойства электронного газа	190
1. Удельная теплоемкость (191). 2. Магнитные свойства (192).	
§ 12. Энергетические потери быстрых электронов	195
§ 13. Теория ферми-жидкости и He^3	196
1. Эффективная масса (198). 2. Удельная теплоемкость (199). 3. Сжимаемость и первый звук (200). 4. Нулевой звук (201).	
Задачи	205
Глава 6. Ядерная материя	207
§ 1. Введение	207
§ 2. Определение ядерной материи	207
§ 3. Ядерные силы	208
1. Единицы измерения (209). 2. Потенциал взаимодействия между двумя нуклонами (209).	
§ 4. Невзаимодействующие нуклоны	210
§ 5. Ряд теории возмущений	212
§ 6. Введение t -матрицы	214
§ 7. Вычисление матричных элементов t -матрицы	216
§ 8. Учет жесткой сердцевины	219
§ 9. Пропагаторный формализм	221
§ 10. Уравнения Бракнера — Гаммеля	223

§ 11. Вычисление параметров ядерной материи	224
1. Методы (224). 2. Результаты (226).	
§ 12. Ядерные взаимодействия и корреляции	226
1. Потенциал «с мягкой сердцевиной» (227) 2. Сингулярность К-матрицы и двухчастичные корреляции (227). 3. Оценка трехчастичных корреляций (230).	
§ 13. Одночастичная энергия и энергия перестройки	231
Задачи	233
Глава 7. Сверхпроводимость	235
§ 1. Введение	235
§ 2. Основные свойства сверхпроводников	235
1. Законы подобия (235) 2 Обращение в нуль сопротивления постоянному току (236). 3. Низкотемпературная теплоемкость (237). 4. Глубина проникновения магнитного поля и длина когерентности (238) 5. Изотопический эффект (241).	
§ 3. Гипотеза о спаривании	242
1. Куперовские пары (244). 2 Величина энергии связи (248)	
§ 4. Теория Бардина – Купера – Шриффера (БКШ)	250
1. Модельный гамильтониан БКШ (250). 2 Волновая функция БКШ (252). 3. Свойства пробной волновой функции (252). 4. Вакуумное состояние (254). 5. Возбужденные состояния (255). 6. Распределение по импульсам (257). 7. Вариационная процедура (258).	
§ 5. Теория БКШ для нулевой температуры	260
1 Интегральное уравнение БКШ (260). 2. Решение для усредненного потенциала (263). 3. Свойства основного состояния (265). 4. Возбужденные состояния (267).	
§ 6. Теория БКШ для конечных температур	269
1. Интегральное уравнение БКШ при конечных температурах (270) 2. Решение для усредненного потенциала (273). 3. Критическое поле и теплоемкость (275).	
§ 7. Коллективные возбуждения и квантование потока	276
§ 8. Теория Андерсона для «грязных» сверхпроводников	278
§ 9. Теория Гинзбурга – Ландау	279
1. Поверхность сверхпроводника (281).	
§ 10. Теория Абринкосова сверхпроводников второго рода	283
Задачи	288
Глава 8. Системы многих бозонов	291
§ 1. Введение	291
§ 2. Фононы	292
1. Коллективные координаты и гармоническое приближение (292). 2. Классический случай (293). 3. Квантовый случай (295). 4. Фонон-фононное взаимодействие (307). 5. Фононы и классических жидкостях (309).	
§ 3. Жидкий He^4	316
1. Идеальный газ Бозе – Эйнштейна (316). 2. Включение взаимодействия (321). 3. Основные феноменологические результаты (321). 4. Двухжидкостная модель и спектр Ландау (324). 5. Спектр Ландау и макроскопические свойства (327). 6. Теория Фейнмана (330). 7. Модель Боголюбова (344).	
§ 4. Заряженный бозе-газ	353
1. Исследование Фолди (354).	
Задачи	356

Глава 9. Большая статистическая сумма	358
§ 1. Введение	358
§ 2. Большая статистическая сумма	358
1. Ряд теории возмущений для статистического оператора (359). 2. Выражение большой статистической суммы через средние величины (360).	
§ 3. Диаграммное разложение	361
1. Нормальные произведения (361). 2. Хронологическое спаривание (362). 3. Графическое представление (362). 4. Правила вычисления вкладов диаграмм (363). 5. Зависимость вкладов от объема (364).	
§ 4. Связь с теорией возмущений для основного состояния	365
§ 5. Другое разложение	366
§ 6. Кольцевые диаграммы	368
§ 7. Уравнение состояния электронного газа	371
1. Предельный случай Дебая – Хюккеля (371). 2. Предельный случай Гелл-Манна и Бракнера (373).	
Задачи	374
Глава 10. Функция Грина	375
§ 1. Введение	375
§ 2. Определения и обобщения	376
§ 3. Квазичастицы	378
§ 4. Функция Грина и U -матрица	383
1. Функция Грина в представлении взаимодействия (384).	
§ 5. Диаграммный анализ одиночастичной функции Грина	386
§ 6. Фурье-преобразование функции Грина	387
1. Вклады нулевого и первого порядков (388). 2. Члены второго порядка (390). 3. Вклад n -го порядка (393).	
§ 7. Неприводимый собственно-энергетический оператор Дайсона	394
1. Приближение Хартри (400). 2. Приближение Хартри – Фока (400). 3. Приближение более высокого порядка (401).	
§ 8. Коллективное движение. Предварительные замечания	402
§ 9. Спектральное представление и коллективные моды	404
§ 10. Теорема разложения по связанным диаграммам для пар частица – дырка	406
1. Обобщенные пары частица – дырка (408).	
§ 11. Диаграммный анализ пропагатора пары частица – дырка	409
§ 12. Полюсы пропагатора и коллективные возбуждения	412
1. Неприводимая, или собственная, поляризация (416). 2. Диэлектрическая проницаемость, зависящая от частоты и волнового вектора (420).	
§ 13. Температурные функции Грина	421
1. Определения (422). 2. Основные свойства и правило сумм (423). 3. Невзаимодействующие фермионы (425). 4. Большая статистическая сумма (426). 5. Физическая интерпретация спектральной функции (427). 6. Уравнения движения (428). 7. Границные условия (431).	
§ 14. Сверхтекущие системы	433
1. Бозоны (433). 2. Фермионы (443).	
Задачи	446
Приложение I. Представление вторичного квантования для одиночстичных операторов	447
Приложение II. Теорема Вика	448
1. Теорема Вика для нормального произведения	448

2. Теорема Вика для хронологического произведения	452
Приложение III. Теорема о петлевых диаграммах	452
Приложение IV. Суммирование кольцевых диаграмм	457
Приложение V. Зависящая от времени теория Хартри – Фока для электронного газа	460
Приложение VI. Коммутатор гамильтониана Савады и $d_q^{\dagger}(k\sigma)$	462
Приложение VII. Энергия возбуждения квазичастиц при больших плотностях	464
Приложение VIII. Некоторые математические соотношения, связанные с законом подобия	467
Вычисление критической температуры	467
Приложение IX. Гамильтониан Фрёлиха для электрон-фононного взаимодействия	468
Каноническое преобразование гамильтониана H'	470
Приложение X. Подробный графический анализ одночастичной функции Грина	471
Литература	483
Предметный указатель	488

Н. МАРЧ, У. ЯНГ, С. САМПАНТХАР

Проблема многих тел в квантовой механике

Редактор И. Г. Нахимсон

**Художник В. Ю. Стойлов. Художественный редактор П. Ф. Некундэ
Технический редактор Н. Д. Толстякова. Корректор Л. А. Брычкова**

Сдано в производство 10/VI-69 г.
Бум. № 3 60×90^{1/16} = 15,5 бум. л. 31 печ. л.
Цена 2 р. 06 к.

Подписано к печати 27/XI-69 г.
Уч.-изд. л. 27. Изд. № 2/5056
Зак. 212

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР», Москва, 1-й Рижский пер., 2

Ордена Трудового Красного Знамени

Ленинградская типография № 2 имени Евгении Соколовой

Главполиграфпрома Комитета по печати при Совете Министров СССР

Измайловский проспект, 29