

ИЗДАТЕЛЬСТВО

«МИР»

Р. Маттук

ФЕЙНМАНОВСКИЕ ДИАГРАММЫ В ПРОБЛЕМЕ МНОГИХ ТЕЛ

A GUIDE
TO FEYNMAN
DIAGRAMS
IN
THE MANY-BODY
PROBLEM

by

Richard D. Mattuck

H. C. OERSTED INSTITUTE

UNIVERSITY OF COPENHAGEN, DENMARK

McGRAW-HILL PUBLISHING COMPANY LIMITED

LONDON

NEW YORK — TORONTO — SYDNEY

1967

ПЕРЕВОД С АНГЛИЙСКОГО

Г. Л. КРАСКО

и

Р. А. СУРИСА

ПОД РЕДАКЦИЕЙ

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧА

Издательство

«МИР»

Москва

1969

Книга Маттука представляет собой введение в диаграммные методы современной теории многих тел. В весьма ясной и доступной форме изложены основные идеи метода; сформулированы важнейшие теоремы. Метод иллюстрируется примерами, содержащими явное решение ряда важнейших задач физики систем многих частиц.

Книгу можно рекомендовать студентам-теоретикам и экспериментаторам, а также научным работникам и преподавателям, специализирующимся по физике твердого тела и знакомым с основами квантовой механики.

Редакция литературы по физике

Предисловие

редактора перевода

Методу функций Грина или, общее, методам теории поля в задаче многих тел в известном смысле повезло: первые монографии на эту тему были написаны практически сразу же после создания самих методов. Однако это были книги, написанные теоретиками для теоретиков. В той же манере выдержано и большинство учебников, написанных в последующие годы. При всей очевидной их полезности и даже необходимости ясен и недостаток: предлагать экспериментатору знакомиться по таким книгам с современной теорией многих тел — это примерно то же, что заставлять студента изучать основы квантовой механики начиная с абстрактного гильбертова пространства. Логически — безукоризненно, методически — бессмысленно. Между тем техника теории поля давно уже переросла рамки «теории для теории», и знакомство с ее элементами сейчас необходимо, вероятно, не меньше, чем знакомство со стандартным аппаратом волновых функций и матричных элементов.

Автор книги, профессор Копенгагенского университета Маттук, взял на себя нелегкий труд написать книгу как раз нужного типа. В ней излагается, в сущности, язык — едва ли не самый популярный язык современной теории многих тел, основанный на систематическом использовании графических методов. Овладев этим языком (что предлагаемая книга вполне позволяет сделать), читатель будет подготовлен к чтению современной литературы по физике систем многих частиц — как монографий сугубо теоретического характера, так и оригинальных статей. Автор в максимальной мере использует одно из основных достоинств диаграммного метода — его наглядность. В этом смысле, пожалуй, поставлен своего рода рекорд — по-видимому, до сих пор никому еще не удавалось с полной четкостью определить понятие функции Грина с помощью игры в детский бильярд!

Ясно понимая (и подчеркивая в своем предисловии), что данная книга составляет лишь первый этап в овладении современными методами теории многих тел, автор рекомендует после каждой главы литературу для дальнейшего чтения. Некоторые из указываемых им сочинений не переведены

6 Предисловие редактора перевода

на русский язык и не всегда доступны; по этой причине было сочтено целесообразным расширить список литературы. Даны также дополнительные ссылки в тексте книги (автор, на наш взгляд, вполне обоснованно избегает сложных выкладок непринципиального характера, отсылая читателя к более «тяжеловесным» трудам).

Можно надеяться, что живо и увлекательно написанная книга Маттука найдет широкую аудиторию. Ее можно рекомендовать студентам (теоретикам и экспериментаторам), интересующимся физикой твердого тела, а также экспериментаторам и инженерам-физикам любого возраста. Особенно следует обратить на нее внимание преподавателей физических и физико-технических факультетов. Перевод книги выполнен Г. Л. Краско (предисловие и гл. 1—8) и Р. А. Сурисом (гл. 9—16, приложения и ответы на задачи).

В. Л. Бонч-Бруевич

Предисловие автора

к русскому изданию

Мне было очень приятно узнать, что готовится издание моей книги на русском языке. Книга посвящена теории многих тел — одной из наиболее зачаровывающих областей современной физики, и я рад, что русские читатели смогут разделить со мной энтузиазм, которым нельзя не проникнуться, заглянув в эту область. Кроме того, издание перевода предоставляет мне благоприятную возможность выразить признагельность русским физикам за тот фундаментальный вклад, который они внесли в теорию многих тел. Их работы существенно использовались в книге. Я особенно хотел бы упомянуть прекрасное описание многочастичных систем с помощью элементарных возбуждений, предложенное Ландау, и поистине новаторскую работу Галицкого и Мигдала, в которой они показали, как можно проанализировать такие возбуждения, используя функции Грина. Эти идеи проложили изящный и универсальный путь к пониманию систем многих частиц и расчету их свойств; они и составляют фундамент, на котором построена вся книга.

Наконец, мне очень приятно поблагодарить профессора Бонч-Бруевича за тот труд, который он на себя взял, по редактированию перевода.

Ричард Ц. Маттук

Копенгаген, 27 февраля 1969 г.

Из предисловия автора

Эта книга написана для неспециалистов, т. е. физиков-экспериментаторов и тех теоретиков, которые не боятся, что их застанут врасплох за чтением чего-то легкого.

Большинству неспециалистов известно, что в настоящее время теория многих тел является очень модной и что она позволяет получать множество фундаментальных результатов во всех областях физики. К сожалению, предмет этой появившейся недавно теории исключительно сложен, а книги написаны на уровне, совершенно недоступном среднему экспериментатору или теоретику, не работающему в этой области.

Цель настоящей книги состоит в том, чтобы заполнить определенный педагогический пробел с помощью несложного введения в один-единственный аспект теории многих тел — метод фейнмановских диаграмм. Поскольку слово „несложный“ вместе со своими родственниками „элементарный“, „вводный“ или „для пятилетнего возраста“ в прошлом производилось в связи с довольно устрашающими сочинениями, я, пожалуй, поясню, что оно означает здесь. Во-первых, оно означает, что, насколько я знаю, настоящая книга проще чего бы то ни было другого уже написанного на тему о современной теории многих тел. Это определяет верхнюю границу понятия „несложный“. Нижняя граница устанавливается с помощью системы, изображенной на фиг. 5. Этот классический пример автор придумал, чтобы объяснить главные идеи проблемы. Вся первая часть книги существенным образом построена на аналогии с этим примером.

Поскольку книга не подпадает ни под одну из обычных категорий, имеет смысл во избежание недоразумений ясно сформулировать, чем она не является. Она не является сама по себе „учебником“ по теории многих тел, а представляет собой просто элементарное введение в учебники, уже существующие в этой области. Она не подготовит читателя к штурму новейшей литературы, а лишь позволит ему только мельком подсмотреть, что делается в этой литературе. Она научит читателя выполнять расчеты, связанные с задачей многих тел не в большей степени, чем лекции из музыкального

лектория научат сочинять музыку; она может, однако, помочь читателю осознать все изящество и значение этих расчетов.

Короче говоря, это не пособие к обычному „элементарному курсу теории многих тел“, потому что такой курс имел бы своей целью подвести начинающих к моменту, когда они окажутся в состоянии выполнять расчеты и решать настоящие задачи в этой области. Эту книгу скорее следует рассматривать главным образом как руководство по „домашнему обучению“ для неспециалистов, пытающихся получить хоть какое-то представление о фейнмановских диаграммах и о том, зачем они вообще нужны в физике многих тел. И, наконец, эта книга может служить (для тех, кто любит начинать с чего-то простого) дополнительным пособием к учебнику по теории многих тел.

Теперь несколько слов о том, как построена книга. Пользуясь масштабом, заданным другими книгами на эту тему, ее можно разделить на три части: детский сад, начальная школа и средняя школа.

Программе детского сада соответствуют гл. 1—6. Они содержат введение к основным идеям проблемы на уровне где-то между книжками об известном Диснеевском утенке Доналде и «American Journal of Physics». Квантовая диаграммная техника развивается здесь по аналогии с прозрачным классическим примером. Сначала детально рассматриваются тривиальные одночастичные системы; это дает возможность читателю прочувствовать метод, показывая ему, каким образом следует подходить к проблемам, которые он и сам легко может решить с помощью элементарной квантовой механики. Так же бесхитростно вводятся и многочастичные диаграммы. Кроме того, читатель найдет здесь краткое введение в метод вторичного квантования. Но это факультативно; в первой части книги метод существенно не используется.

Руководство для детского сада может рассматриваться и как самостоятельная книга для тех, кто хочет узнать лишь столько, сколько необходимо, чтобы не дрожать в благоговейном ужасе, когда специалист по теории многих тел покрывает всю доску фейнмановскими диаграммами.

Главы 7—16 соответствуют уровню начальной школы. Содержание их — от вторичного квантования до сверхпроводимости — обычно для большинства других книг по теории многих тел. Однако изложение здесь значительно более элементарно и несколько ограничено. Это означает главным образом, что, во-первых, из физических свойств системы рас-

считаются только энергии основного и возбужденного состояний и, во-вторых, аналитические свойства функций Грина не рассматриваются вообще. Вместо этого автор сконцентрировал усилия исключительно на том, чтобы выработать у читателя способность чувствовать сами диаграммы, их физический смысл и научить его различным приемам суммирования, необходимым при работе с диаграммами. Новым с точки зрения педагогики в этих главах является то, что все расчеты полностью проводятся с помощью диаграмм — вплоть до того момента, когда решение с языка диаграмм переводится на язык интегралов; в этом месте автор просто постулирует численный результат, отсылая читателя за подробностями интегрирования к подходящей книге или статье.

Приложения I—X составляют содержание третьей части книги — средней школы. Она начинается с краткого обзора дираковского формализма и содержит более или менее строгий вывод правил построения диаграмм.

В конце каждой главы дается несколько коротких упражнений; ответы к ним помещены в конце книги.

Все, что выделено в тексте мелким шрифтом и вертикальной линейкой, предназначено для факультативного чтения.

Эта книга выросла из серии лекций, которые автор читал в течение 1962—1965 гг. для студентов, изучающих физику твердого тела в Копенгагенском университете. Среди многих людей, которые оказывали мне в это время поддержку, я хочу особенно поблагодарить профессора Г. Йенсена как за предоставленную мне возможность проникнуть в эту область — теорию многих тел, так и за многочисленные беседы с ним, наполнявшие меня чувством уверенности. Я также очень благодарен проф. М. Пилу за его критику рукописи на ранних стадиях и за доброжелательное к ней отношение.

Я хотел бы отметить очень ценные замечания по улучшению рукописи, сделанные проф. О. Таулесом из Бирмингемского университета и д-ром А. Тэйлором из Университета в Ливерпуле.

Из моих коллег мне хочется особенно поблагодарить, во-первых, Б. Йохансена из NORDITA за бесконечно долгие и оживленные дискуссии по теории многих тел, которые мы вели вдвоем, и за чтение и критику рукописи в целом и, во-вторых, Ф. Грейзена из Голландской высшей технической школы за ту необыкновенную внимательность, с которой он прочел первый полный вариант книги, указал на бесчисленные ошибки — в противном случае они остались бы

незамеченными — и за многие ценные советы. Я также благодарен Р. Лоту за его исключительно полезную критику.

Кроме того, я хотел бы поблагодарить проф. Дж. Брауна, чьи лекции по теории многих тел в Институте Нильса Бора (1960 — 1961 гг.) послужили для меня отправной точкой. И, наконец, я признателен моему брату проф. Артуру Маттуку (Массачусетский технологический институт) за исключительно полезные советы и моей жене Алисе Маттук за внимательное чтение и критику шуток.

Ричард Д. Маттук

ДИАГРАММЫ ФЕЙНМАНА И ЗАДАЧА МНОГИХ ТЕЛ

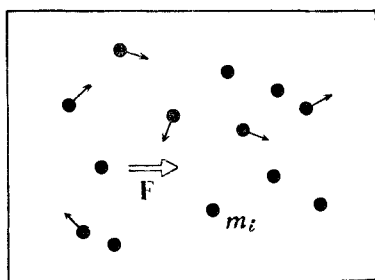
§ 1. Что такое задача многих тел и для чего нужны фейнмановские диаграммы

Разумной отправной точкой при рассмотрении проблемы многих тел мог бы служить следующий вопрос: сколько нужно тел, чтобы возникла проблема? Проф. Дж. Браун отмечал, что лица, интересующиеся точными решениями, могут найти ответ на этот вопрос, заглянув в историю. Для ньютоновской механики XVIII века задача трех тел была неразрешимой. С рождением общей теории относительности (где-то около 1910 г.) и квантовой электродинамики (1930 г.) стали неразрешимыми задачи двух и одного тела. В современной квантовой теории поля неразрешимой оказывается задача нуля тел (вакуума). Так что если мы интересуемся точными решениями, то ни одного тела — это уже слишком много.

Конечно, фактически совершенно точные решения нас не интересуют; соответственно попытаемся поставить вопрос получше. Пусть мы имеем систему большого числа частиц, таких, например, как молекулы воды в стакане с водой, протоны и нейтроны в ядре свинца или молекулы кислорода в баллоне с газообразным кислородом. Система такого рода схематично показана на фиг. 1. Проблема, которой мы будем интересоваться, состоит в том, чтобы объяснить наблюдаемые свойства системы, зная, как ведут себя составляющие ее частицы. Так, например, нам хотелось бы рассчитать теплоемкость воды, или магнитный момент ядра, или сжимаемость кислорода.

Прежде всего надо понять, что наличие в системе многих частиц само по себе еще не приводит к задаче многих тел. Представьте себе, например, что частицы не взаимодействуют друг с другом. Так приблизительно обстоит дело в баллоне с кислородом, если плотность газа достаточно

низка и вследствие этого молекулы находятся так далеко друг от друга, что столкновения между ними очень редки. Видно, что в этом случае каждая частица ведет себя независимо от других, поэтому можно просто исследовать поведение каждой частицы в отдельности. (Заметьте, что в системе тождественных невзаимодействующих бозонов или фермионов движение частиц коррелировано, поскольку волновая функция всей системы симметрична или антисимметрична. Тем не менее при выполнении расчетов частицы можно считать независимыми, а соответствующую симметризацию провести в конце.) Иными словами, мы имеем дело здесь не с одной задачей многих тел, а скорее со многими задачами



Фиг. 1. Система многих тел.

одного тела. Разумеется, для тождественных частиц все эти задачи одинаковы.

Настоящая задача многих тел возникает в системе частиц, взаимодействующих друг с другом. Здесь мы уже не можем считать частицы независимыми, а должны принимать во внимание невообразимо сложное влияние, которое каждая частица оказывает на поведение всех остальных. Кроме газов, почти все физические системы принадлежат к этому типу — молекулы в жидкости, электроны в твердом теле, протоны и нейтроны в атомном ядре и т. п.

Таким образом, мы приходим к следующему определению:

Задача многих тел состоит в изучении влияния взаимодействия между частицами на поведение составляемой ими системы.

Например, мы интересуемся влиянием, которое взаимодействие оказывает на величину энергии основного и возбужденного состояний, термодинамические характеристики, электрические и магнитные свойства и т. д. В общем случае

задача многих тел предельно трудна благодаря невероятной запутанности движения частиц в системе со взаимодействием.

Одним из наиболее удачных ранних методов решения задачи, который используется и до сих пор, был метод *канонических преобразований*. Он состоит в переходе в уравнении Шредингера к новой совокупности координат, вследствие чего член, описывающий взаимодействие, становится небольшим. Принципиальный недостаток этого метода состоит в том, что он не столь универсален, как хотелось бы, и это иногда затрудняет его использование. Именно отсутствие универсального метода держало теорию многих тел в колыбели вплоть до 50-х годов.

Положение радикально изменилось в 1956—1957 гг., когда в серии новаторских работ было показано, что методы *квантовой теории поля*, уже ставшие знаменитыми благодаря успешному их применению в физике элементарных частиц, могут служить унифицированным и мощным оружием штурма задачи многих тел. Новый ключ открывал многие двери, и в течение короткого времени эта идея была использована в теориях ядра, сверхтекучести, сверхпроводимости, электронов в металле, фононов, ферромагнетиков, плазмы, атомов, молекул и т. д. За последние 10 лет теория многих тел достигла совершеннолетия, и стало возможным осуществление все более и более многочисленных увлекательных и фундаментальных исследований природы вещества. Она проникла столь глубоко в столь многие области современной физики, что для всех физиков стало необходимым приобрести хотя бы элементарные сведения о ней. Наша цель и состоит в том, чтобы дать эти минимальные сведения.

В этой книге мы уделим основное внимание теоретико-полевому методу, известному как метод *функций Грина*. Он основывается на той идее, что для нахождения важных физических характеристик системы нужно знать отнюдь не детальное поведение каждой частицы, а скорее только усредненное поведение одной или двух типичных частиц. Величины, описывающие это усредненное поведение, называются соответственно *одночастичной* и *двухчастичной функциями Грина*.

Рассмотрим сначала одночастичную функцию Грина. В системе со взаимодействием, очевидно, безнадежно пытаться детально описать чудовищно сложное движение частицы между двумя точками в пространстве. Но мы можем описать движение „в среднем“, задавая вероятности (или в квантовых системах *амплитуды вероятности*) движения.

Так, одночастичная функция распространения, или функция Грина $G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$, определяется как вероятность (амплитуда) того, что некоторая частица в системе придет в точку \mathbf{r}_2 в момент времени t_2 , если она начала двигаться („распространяться“) из точки \mathbf{r}_1 в момент t_1 . Двухчастичная функция Грина определяется аналогичным образом. С помощью этих двух функций можно описать физические свойства системы многих тел.

Метод вычисления функций Грина, которым мы будем пользоваться, — это метод *диаграмм Фейнмана*. Чтобы дать беглое представление о том, что такое эти диаграммы, рассмотрим следующий простой пример. Человек, выпивший лишнего, прощается со своими приятелями в точке \mathbf{r}_1 и по дороге домой в точку \mathbf{r}_2 он может навестить один или несколько баров — бар A, B, C и т. д. Мы ищем вероятность $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ того, что он попадет домой. Эта вероятность, которая и есть как раз функция Грина (время мы для простоты опускаем), равна сумме вероятностей различных маршрутов, по которым человек может прийти из точки \mathbf{r}_1 в \mathbf{r}_2 , взаимодействуя по пути с различными барами. Если предположить для простоты, что различные события происходят независимо, то искомая вероятность оказывается равной $P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ (вероятность того, что человек „свободно“ дойдет из \mathbf{r}_1 в \mathbf{r}_2 , т. е. не будет останавливаться в барах) плюс $P_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_1) \times P(A) \times P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_A)$ (вероятность того, что он дойдет „свободно“ от \mathbf{r}_1 до бара A , умноженная на вероятность того, что он выйдет из бара A и будет в состоянии продолжать движение, и умноженная на вероятность свободного следования в точку \mathbf{r}_2), плюс $P_0(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_1) \times P(B) \times P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_B)$ (вероятность маршрута $\mathbf{r}_1 - \text{бар } B - \mathbf{r}_2$), плюс и т. д., плюс $P_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_1) \times P(A) \times P_0(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) \times P(B) \times P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_B)$ (вероятность маршрута $\mathbf{r}_1 - A - B - \mathbf{r}_2$), плюс и т. д. Таким образом мы получаем функцию Грина в виде бесконечного ряда „возмущений“

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = & P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + P_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_1) P(A) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_A) + \\
 & + P_0(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_1) P(B) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_B) + \dots \\
 & + P_0(\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_1) P(A) P_0(\mathbf{r}_B, \mathbf{r}_A) P(B) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_B) + \dots \quad (1.1)
 \end{aligned}$$

Каждый член этого ряда можно представить в виде диаграммы следующим образом: изобразим величину $P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$ (вероятность свободного движения из точки \mathbf{r}_i в точку \mathbf{r}_j) сплошной линией $\mathbf{r}_i \longrightarrow \mathbf{r}_j$, а $P(X)$ (вероятность благополучного ухода из бара X) — кружком (X) . Тогда ряд можно

изобразить в виде

$$\begin{array}{c} \mathbf{r}_2 \\ \parallel \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 \end{array} = \begin{array}{c} \mathbf{r}_2 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_2 \\ \uparrow \\ \textcircled{A} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_2 \\ \uparrow \\ \textcircled{B} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \mathbf{r}_2 \\ \uparrow \\ \textcircled{B} \\ \uparrow \\ \textcircled{A} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 \end{array} + \dots \quad (1.2)$$

Поскольку каждому элементу диаграммы соответствует определенный множитель, эта запись полностью эквивалентна выражению (1.1). Она имеет, однако, огромное преимущество, так как выявляет физический смысл ряда, давая нам „карту“, помогающую проследить всю последовательность взаимодействий пьяного человека на пути от \mathbf{r}_1 до \mathbf{r}_2 .

В системе многих тел вместо движения пьяного человека, взаимодействующего с различными барами, мы имеем движение частицы, взаимодействующей с другими частицами системы. Изобразим взаимодействие между частицей в точке \mathbf{r} и частицей в точке \mathbf{r}' волнистой линией

$$\mathbf{r} \text{---} \text{~~~~~} \text{---} \mathbf{r}' \quad (1.3)$$

Тогда, подобно случаю пьяного человека, функцию Грина $G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ можно представить в виде суммы всех диаграмм, изображающих частицу, начавшую движение в точке \mathbf{r}_1 в момент t_1 , провазимодействовавшую нуль, один или более раз с другими частицами системы и окончившую свой путь в точке \mathbf{r}_2 в момент t_2 :

$$\begin{array}{c} \mathbf{r}_2, t_2 \\ \parallel \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1, t_1 \end{array} = \begin{array}{c} \mathbf{r}_2, t_2 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1, t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_2, t_2 \\ \uparrow \\ \textcircled{} \\ \mathbf{r}', t' \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1, t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_2, t_2 \\ \uparrow \\ \text{~~~~~} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1, t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_2, t_2 \\ \uparrow \\ \text{~~~~~} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1, t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_2, t_2 \\ \uparrow \\ \text{~~~~~} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1, t_1 \end{array} + \dots \quad (1.4)$$

Диаграмма *a* показывает „свободное“ движение из \mathbf{r}_1, t_1 в \mathbf{r}_2, t_2 . Диаграммы *б* и *в* изображают частицу, испытывающую

единичное столкновение с другой частицей. На диаграммах g и d — два столкновения и т. д. (Детальная интерпретация этих диаграмм более трудна, чем в случае с пьяным человеком, поэтому мы отложим ее до гл. 4.) Как и для функции Грина пьяного человека, каждая диаграмма в (1.4) соответствует определенному члену в разложении функции Грина по степеням возмущения (мы рассмотрим это в гл. 4). Подобные же диаграммы используются и в случае двухчастичной функции Грина.

Картинки, из которых построена схема (1.4), называются *фeyнмановскими диаграммами* в честь человека, который их придумал, — Ричарда П. Фейнмана. Он использовал такие диаграммы в своей работе по квантовой электродинамике, за которую получил Нобелевскую премию. Диаграммы Фейнмана очень широко применяются в физике элементарных частиц.

Каким именно образом диаграммы используются при фактическом вычислении функции Грина, мы рассмотрим в конце этой главы. Сначала, однако, изложим вкратце метод канонических преобразований. Это позволит нам создать необходимый фон для понимания важности новой техники, позаимствованной из квантовой теории поля.

§ 2. Метод канонических преобразований

Сформулируем сначала количественно наши замечания относительно системы N невзаимодействующих частиц. Пусть эти частицы обладают массами m_1, m_2, \dots, m_N , и пусть они помещены в не зависящее от времени поле внешней силы $\mathbf{F}(\mathbf{r})$, которому соответствует потенциал $V(\mathbf{r})$. Наша задача — выяснить, каково будет поведение частиц. В классическом случае система описывается N независимыми уравнениями движения

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1.5)$$

решения которых имеют вид

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(t).$$

В квантовомеханическом случае уравнения (1.5) заменяются уравнением Шредингера

$$H\Psi = E\Psi, \quad \text{где} \quad H = \sum_{i=1}^N H_i, \quad H_i = \frac{p_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{r}_i); \quad (1.6a)$$

H , Ψ и E суть соответственно гамильтониан, волновая функция и энергия всей системы; H_i , \mathbf{p}_i , $V(\mathbf{r}_i)$ — гамильтониан, импульс и потенциальная энергия одной частицы. Если записать Ψ в виде произведения (для простоты пренебрегая требованиями симметрии)

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_{k_i}(\mathbf{r}_i) \quad (1.6б)$$

и подставить в уравнение (1.6а), то окажется, что последнее разделится на N одночастичных уравнений Шредингера

$$H_i \phi_{k_i}(\mathbf{r}_i) = E_{k_i} \phi_{k_i}(\mathbf{r}_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.6в)$$

При этом полная энергия равна в точности сумме одночастичных энергий

$$E = \sum_i E_{k_i}. \quad (1.6г)$$

Таким образом, как в классической, так и в квантовой механике невзаимодействующих частиц мы имеем N независимых уравнений. Это как раз и означает, что проблема сводится к N задачам одного тела.

В реальной задаче многих тел, как мы уже видели, частицы взаимодействуют друг с другом. Это значит, что в классическом случае необходимо решить N связанных уравнений

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1.7)$$

где $\mathbf{F}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ есть сила взаимодействия между двумя частицами. В квантовом случае появляется одно уравнение Шредингера, переменные в котором уже не разделяются:

$$\left\{ \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j=1 \\ (i \neq j)}}^N V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) \right\} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (1.8)$$

где $V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j)$ — потенциальная энергия взаимодействия двух частиц, в общем случае зависящая от импульсов.

Для дальнейшего было бы удобно ввести различие между „слабым“ и „сильным“ взаимодействиями. Мы будем называть взаимодействие „слабым“, а соответствующий член в (1.8) „малым“, если оно приводит лишь к небольшому возмущению решения для невзаимодействующей системы, т. е. если его можно учесть в конечном порядке обычной теории

возмущений. Если же с взаимодействием нельзя справиться таким простым образом, то мы будем называть его „сильным“ или „большим“. Большинство взаимодействий, с которыми приходится иметь дело, относятся к типу сильных. Рассмотрим, например, кулоновское взаимодействие между электронами в металле. Потенциальная энергия его имеет вид

$$V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}.$$

Если вычислять энергию основного состояния системы, рассматривая взаимодействие как возмущение, то получается результат

$$E_0 = E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + \infty + \infty + \infty + \dots,$$

т. е. бесконечности во всех порядках теории возмущений, кроме первого! (Следует отметить, что существуют некоторые взаимодействия, небольшие по величине, но все же такие, что их нельзя рассматривать как малые возмущения. К ним относится, например, слабое притяжение между электронами, приводящее к сверхпроводимости. В соответствии с принятой нами классификацией такие взаимодействия также будут называться „сильными“.)

Попытку проследить за движением системы N сильно взаимодействующих частиц можно уподобить, грубо говоря, усилиям болельщика, который пытался бы смотреть баскетбольный матч с N мячами. Поэтому в ранних работах по теории многих тел пытались свести дело к задаче одного тела, отделившись от взаимодействия. Для этой цели надо либо сделать вид, что взаимодействия вовсе не существуют, либо, более легально, избавиться от него с помощью какого-либо преобразования. В классическом случае такое преобразование подразумевает переход к новой совокупности координат, в которых уравнения движения (1.7) становятся приближенно независимыми. Например, в простых ситуациях иногда оказывается возможным ввести такие новые координаты \mathbf{R}_k , определяемые равенствами

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_k, \dots, \mathbf{R}_N), \quad (1.9)$$

что в новых переменных уравнения (1.7) примут вид

$$\ddot{f}(\mathbf{R}_k) = M_k \frac{d^2 \mathbf{R}_k}{dt^2} + \underbrace{\sum_i h(\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_i)}_{\text{Малая величина}}. \quad (1.10)$$

Величины M_k называются „эффективными массами“. Уравнения (1.10) определяют совокупность N почти независимых задач „одного тела“, которые можно решить более или менее точно, а оставшееся малое взаимодействие $h(\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_l)$ учесть с помощью теории возмущений. „Тела“ теперь являются, конечно, не настоящими, а скорее *фиктивными*.

Идею о превращении системы взаимодействующих реальных частиц в систему приближенно невзаимодействующих фиктивных тел легко проиллюстрировать, рассматривая две взаимодействующие частицы в гравитационном поле. Пусть массы этих частиц будут m_1, m_2 ; координаты $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$; гравитационные силы $\mathbf{F}_1 = m_1 \mathbf{g}, \mathbf{F}_2 = m_2 \mathbf{g}$, а сила их взаимодействия $\mathbf{F}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Частицы подчиняются уравнениям движения

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= m_1 \ddot{\mathbf{r}}_1, \\ \mathbf{F}_2 - \mathbf{F}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= m_2 \ddot{\mathbf{r}}_2. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Задача сводится к двум независимым задачам одного тела, если перейти к новым координатам:

$$\begin{aligned} (m_1 + m_2) \mathbf{R} &= m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2, & \mathbf{R} & \text{— координата центра масс,} \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, & \mathbf{r} & \text{— относительная координата.} \end{aligned} \quad (1.12)$$

Складывая уравнения (1.11), мы получаем

$$F_{\text{полн}} = (m_1 + m_2) \ddot{\mathbf{R}}. \quad (1.13)$$

Умножая одно уравнение на m_2 , а второе на m_1 и вычитая второе из первого, находим

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \ddot{\mathbf{r}}. \quad (1.14)$$

Таким образом, мы имеем два новых независимых уравнения: одно — для фиктивной частицы с эффективной массой $(m_1 + m_2)$, находящейся в центре масс \mathbf{R} , а второе — для фиктивной частицы с эффективной массой $m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ и координатой, равной относительной координате \mathbf{r} .

Однако новые невзаимодействующие фиктивные тела не всегда похожи на частицы. Рассмотрим, например, хорошо известный случай одномерной цепочки из N атомов, показанной на фиг. 2, в которой между ближайшими соседями действуют гармонические силы. Классическое уравнение движения для такой системы имеет вид

$$-2k_c u_n + k_c (u_{n+1} + u_{n-1}) = m \frac{d^2 u_n}{dt^2}, \quad (1.15)$$

где u_n — смещение n -го атома из положения равновесия, k_c — упругая постоянная, m — масса атома. Преобразование (1.9) в данном случае есть просто преобразование Фурье

$$u_n = \sum_k U_k e^{-iknd}. \quad (1.16)$$

Подстановка этого выражения в (1.15) приводит к независимым уравнениям типа (1.10)

$$2k_c (\cos kd - 1) U_k = m \frac{d^2 U_k}{dt^2} + 0, \quad (1.17)$$

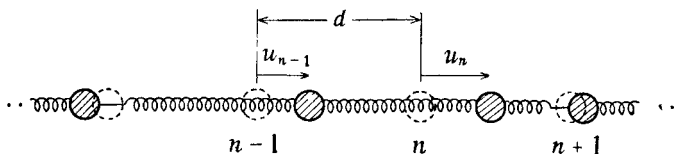
которые имеют решения

$$U_k = A_k e^{i\omega_k t}, \quad \omega_k = \sqrt{\frac{2k_c}{m} (1 - \cos kd)}. \quad (1.18)$$

Если все величины A_k , кроме одной, равны нулю, то (1.16) принимает вид

$$u_n = A_k e^{-i(knd - \omega_k t)}. \quad (1.19)$$

Это есть синусоидальное продольное колебание, или „звуковая волна“ с частотой ω_k и длиной волны $\lambda = 2\pi/k$, распро-



Фиг. 2. Цепочка из гармонически связанных атомов.

страняющаяся по цепочке. Таким образом, фиктивные „тела“ здесь представляют собой волны, а не частицы.

В квантовом случае часто можно поступать таким же образом; надо произвести каноническое преобразование над гамильтонианом H , чтобы член с взаимодействием стал малым. Попробуем ввести новые координаты \mathbf{R}_k и импульсы \mathbf{P}_k с помощью соотношений

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i &= \mathbf{r}_i(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_k, \dots, \mathbf{R}_N; \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_k, \dots, \mathbf{P}_N), \\ \mathbf{p}_i &= \mathbf{p}_i(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N; \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_N). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Заметим при этом, что по определению канонического преобразования новые координаты \mathbf{R}_i , \mathbf{P}_i должны удовлетворять тем же каноническим соотношениям коммутации, что и \mathbf{r}_i , \mathbf{p}_i , т. е.

$$[\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j] = 0, \quad [\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j] = 0. \quad (1.20a)$$

Получаем

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_i H(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) \rightarrow \\
 &\rightarrow H' = \sum_q H'(\mathbf{P}_q, \mathbf{R}_q) + \frac{1}{2} \sum_{q,m} \underbrace{V'(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_m; \mathbf{P}_q, \mathbf{P}_m)}_{\text{Малая величина}}. \quad (1.21)
 \end{aligned}$$

Если это можно сделать, то проблема сводится к совокупности N приближенно независимых задач одного тела

$$H'(\mathbf{P}_q, \mathbf{R}_q) \phi'_q = E'_q \phi'_q \quad (1.22)$$

с малым возмущением V' . Уравнения (1.22) описывают независимые фиктивные тела в квантовом случае. Полная энергия квантовой системы равна сумме энергий фиктивных тел

$$E = \sum_q E'_q. \quad (1.23)$$

Простой пример преобразования (1.21) дает нам квантовая система двух взаимодействующих частиц. Эта система подчиняется уравнению (в предположении отсутствия гравитационного поля)

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (1.24)$$

где

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla. \quad (1.25)$$

Переходя к координатам центра масс и относительным координатам [см. (1.12)], находим

$$H = H(\mathbf{R}) + H(\mathbf{r}),$$

где

$$H(\mathbf{R}) = \frac{p_R^2}{2(m_1 + m_2)}, \quad H(\mathbf{r}) = \frac{p_r^2}{2\left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right)} + V(\mathbf{r}). \quad (1.26)$$

Отсюда следуют два уравнения Шредингера

$$\begin{aligned}
 H(\mathbf{R}) \phi_k(\mathbf{R}) &= E_k \phi_k(\mathbf{R}), \\
 H(\mathbf{r}) \gamma_l(\mathbf{r}) &= E_l \gamma_l(\mathbf{r}),
 \end{aligned} \quad (1.27)$$

описывающих два фиктивных объекта типа частиц, таких же, как и в соответствующем классическом случае.

Преобразование (1.21) можно проделать и для случая цепочки атомов на фиг. 2 (подробнее см. [68] или [28]).

Гамильтониан цепочки (в пренебрежении концевыми эффектами) имеет вид

$$H = \sum_{n=1}^N \left(\frac{p_n^2}{2m} + k_c u_n^2 \right) - \frac{1}{2} k_c \sum_{n=1}^N (u_n u_{n+1} + u_n u_{n-1}) = \\ = \sum_{n=1}^N \left(\frac{p_n^2}{2m} + k_c u_n^2 \right) - k_c \sum_{n=1}^N u_n u_{n+1}. \quad (1.28)$$

Первый член здесь описывает совокупность независимых гармонических осцилляторов (по одному в каждой точке, соответствующей положению атома), в то время как второй член отвечает взаимодействию между каждым атомом и его ближайшими соседями. Оказывается, что преобразование (1.20) в этом случае принимает вид

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(\mathcal{U}_q \cos qnd - \frac{1}{m\omega_q} \mathcal{P}_q \sin qnd \right), \quad (1.29)$$

$$p_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q (m\omega_q \mathcal{U}_q \sin qnd + \mathcal{P}_q \cos qnd), \quad (1.30)$$

где

$$\omega_q = \sqrt{\frac{2k_c}{m} (1 - \cos qd)}. \quad (1.31)$$

Величины \mathcal{U}_q и \mathcal{P}_q подчиняются каноническим правилам коммутации

$$[\mathcal{U}_q, \mathcal{P}_{q'}] = i\hbar \delta_{q,q'}, \quad [\mathcal{U}_q, \mathcal{U}_{q'}] = 0, \quad [\mathcal{P}_q, \mathcal{P}_{q'}] = 0, \quad (1.32)$$

в чем можно убедиться, подставив выражения (1.29) и (1.30) в (1.20 а) и полагая $\mathbf{r}_i \equiv u_i$. Используя в выражении (1.28) соотношения (1.29), (1.30) и (1.32), получаем после ряда скучных вычислений

$$H' = \sum_q \left[\frac{\mathcal{P}_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2}{2} \mathcal{U}_q^2 \right]. \quad (1.33)$$

Это есть сумма обыкновенных гамильтонианов гармонических осцилляторов с различными частотами. Заметим, что обычно вместо (1.29) и (1.30) совершается преобразование

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q U_q e^{-iqnd}, \quad p_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q P_q e^{+iqnd},$$

которое не приводит к полному расщеплению гамильтониана: остаются перепутанными колебания с волновыми векторами q

и $-q$. В результате же преобразования (1.29) и (1.30) гамильтониан оказывается полностью расцепленным на сумму независимых частей. Уравнение Шредингера для q -го осциллятора и собственные значения его энергии хорошо известны:

$$\begin{aligned} H'_q \phi'_q &= \left(\frac{\mathcal{P}_q^2}{2m} + \frac{m\omega_q^2}{2} \mathcal{U}_q^2 \right) \phi'_q = E'_q \phi'_q, \\ E'_q &= \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right), \quad n_q = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (1.34)$$

так что полная энергия и полная волновая функция системы равны

$$\begin{aligned} E &= \sum_q \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right), \\ \Psi &= \phi'_{q_1} \phi'_{q_2} \dots \phi'_{q_n} \dots \end{aligned} \quad (1.35)$$

Таким образом, независимые „фиктивные тела“ в данном случае суть просто квантованные продольные звуковые волны.

Полезно вспомнить, как получаются результаты (1.34) с помощью методов операторной алгебры (см., например, [49]). В этом случае над H'_q производится дополнительное преобразование, использующее операторы b_q и b_q^\dagger :

$$\begin{aligned} b_q &= \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega_q}} \mathcal{P}_q - i \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} \mathcal{U}_q, \\ b_q^\dagger &= \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega_q}} \mathcal{P}_q + i \sqrt{\frac{m\omega_q}{2\hbar}} \mathcal{U}_q. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Как легко проверить с помощью соотношений коммутации (1.32), операторы b_q и b_q^\dagger подчиняются следующим правилам коммутации:

$$[b_q, b_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}, \quad (1.37a)$$

$$[b_q, b_{q'}] = 0, \quad (1.37б)$$

$$[b_q^\dagger, b_{q'}^\dagger] = 0. \quad (1.37в)$$

Используя в (1.34) преобразование, обратное (1.36), и равенство (1.37 а), получаем новые гамильтониан и уравнение Шредингера

$$H''_q = \hbar\omega_q \left(b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right), \quad H''_q \phi''_q = E'_q \phi''_q. \quad (1.38)$$

С помощью соотношений (1.37а) – (1.37в) и (1.38) можно показать (см. [49]), что если ψ_{0q} есть собственная функция

оператора H''_q , отвечающая наименьшей энергии, то другие собственные функции имеют вид

$$\phi''_q \equiv \psi_{n_q} = \frac{1}{\sqrt{n_q!}} (b_q^\dagger)^{n_q} \psi_{0,q}, \quad n_q = 0, 1, 2, \dots \quad (1.39a)$$

(ψ_{n_q} — сокращенная запись функции $\psi_{(n_q)q}$). Соответствующие им энергии суть

$$E'_q = \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right), \quad (1.39б)$$

что совпадает с выражением (1.34). Можно также установить следующие важные свойства операторов b , характеризующие их действие на собственные функции оператора энергии:

$$b_q^\dagger \psi_{n_q} = \sqrt{n_q + 1} \psi_{n_q+1}, \quad (1.40a)$$

$$b_q \psi_{n_q} = \sqrt{n_q} \psi_{n_q-1}, \quad (1.40б)$$

$$b_q^\dagger b_q \psi_{n_q} = n_q \psi_{n_q}. \quad (1.40в)$$

Заметим, что дополнительное преобразование (1.36) превращает оператор H' из (1.33) в

$$H'' = \sum_q \hbar\omega_q \left(b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right) = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_q \hbar\omega_q}_{E_0} + \sum_q \hbar\omega_q b_q^\dagger b_q, \quad (1.41)$$

при этом уравнение Шредингера принимает вид

$$H'' \Psi_{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_q, \dots} = E \Psi_{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_q, \dots},$$

где

$$\Psi_{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_q, \dots} = \psi_{n_{q_1}} \psi_{n_{q_2}} \dots \psi_{n_q} \dots \quad (1.42)$$

§ 3. Элементарные возбуждения

Результаты последнего параграфа показывают, каким образом классическую или квантовую задачу многих сильно взаимодействующих тел часто удается решить с помощью преобразования системы к совокупности почти независимых или точно независимых, как в рассмотренных нами простых случаях, фиктивных тел. Существует более современный (но эквивалентный) способ рассмотрения этих фиктивных тел, который обладает тем преимуществом, что дает единую картину систем многих частиц. Он основывается на представлении об *элементарных возбуждениях* и отражает точку зрения, которая будет проводиться через всю книгу.

Чтобы понять, что такое элементарные возбуждения и какое они имеют отношение к фиктивным телам, рассмотрим частный случай — *фонон*. Вспомним сначала, что световые волны можно рассматривать как квантованные осцилляторы излучения или считать, что они состоят из частиц („квантов“), называемых фотонами, каждый из которых имеет энергию $\hbar\omega$. Это наводит на мысль рассматривать и звуковые волны аналогичным образом¹⁾. Посмотрев внимательно на результат (1.34), мы увидим, что звуковую волну с волновым вектором q не обязательно объявлять фиктивным телом (гармоническим осциллятором) с квантованной энергией $E'_q = \hbar\omega_q \times \times (n_q + \frac{1}{2})$. Вместо этого можно было бы рассматривать ее и как совокупность n_q квантов с энергией $\hbar\omega_q$ каждый плюс основное состояние с энергией $\frac{1}{2}\hbar\omega_q$. Эти кванты звуковой волны называются *фононами*. Подобно фотонам, они ведут себя в значительной мере как частицы (т. е. частицы в квантовомеханическом смысле слова — они не обязательно локализованы, хотя и могут быть локализованы; см. [28]). Здесь необходимо отметить, что фонон обычно называют „квантованной звуковой волной“, но в соответствии со сказанным выше это неверно. С данным n_q связана только одна квантованная звуковая волна с волновым вектором q (это и есть фиктивное тело с энергией E'_q), но существует много — n_q — фононов с волновым вектором q . Поэтому более правильно называть фонон квантом или частицей звука.

Величина $\hbar\omega_q$, очевидно, представляет собой наименьшую порцию энергии возбуждения над основным уровнем (энергия которого есть $\frac{1}{2}\hbar\omega_q$). Так как фонон несет эту наименьшую энергию, его и рассматривают как *элементарное возбуждение*. Тогда „сложное возбуждение“ есть просто возбуждение, содержащее много фононов.

Фононная точка зрения на звуковую волну предполагает новую интерпретацию волновой функции и операторов b_q^+ , b_q . Функция $\Psi_{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots, n_q, \dots}$ в (1.42) описывает, очевидно, систему из n_{q_1} фононов с волновым вектором q_1 ; n_{q_2} фононов с волновым вектором q_2 и т. д. Поэтому, как следует из формул (1.40), оператор b_q^+ создает фонон с волновым вектором q , а оператор b_q уничтожает его; произведение же $b_q^+ b_q$ есть „оператор числа“ фононов с волновым вектором q .

¹⁾ Эта идея впервые была высказана И. Е. Таммом (1931 г.). — *Прим. ред.*

Важная особенность фононов в противоположность квантованным звуковым волнам состоит в том, что полная энергия системы не равна сумме энергий всех фононов, хотя, как видно из (1.35), она равна сумме энергий всех квантованных звуковых волн. Иными словами, соотношение (1.23) для фононов несправедливо. Действительно, из формулы (1.41) видно, что полная энергия получается, если к энергии фононов добавить еще энергию основного состояния. Таким образом, выражение (1.41) приводит к представлению о любом возбужденном состоянии системы как построенном из основного состояния и совокупности независимых фононов, описывающих энергию возбуждения.

Этот результат, обнаруженный нами в случае фононов, оказывается предельно общим. В настоящее время ясно, что для большинства систем многих тел возможно перейти от системы сильно взаимодействующих частиц к совокупности почти независимых элементарных возбуждений над основным состоянием. Таким образом, по аналогии с (1.41) мы можем написать преобразование (1.21) в виде

$$H = \sum_i H(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) \rightarrow$$

$$\rightarrow H' = E_0 + \sum_q \epsilon'_q A_q^\dagger A_q + \underbrace{f(\dots A_k \dots A_k^\dagger \dots)}_{\text{Малая величина}}. \quad (1.43)$$

Здесь E_0 есть энергия основного состояния системы взаимодействующих частиц, ϵ'_q — энергия элементарного возбуждения, A_q^\dagger , A_q и $A_q^\dagger A_q$ — операторы рождения, уничтожения и числа элементарных возбуждений. (Зависимость ϵ'_q от волнового вектора q часто называют „законом дисперсии“ или „спектром возбуждения“.)

Малый по величине член в (1.43) описывает взаимодействие между элементарными возбуждениями. С ним связаны уширения $\Delta\epsilon'_q$ уровней энергии ϵ'_q . В соответствии с принципом неопределенности $\Delta E \Delta t \sim \hbar$; это означает, что элементарные возбуждения имеют *время жизни* $\tau_q \sim \hbar (\Delta\epsilon'_q)^{-1}$. Время жизни должно быть, конечно, достаточно большим (т. е. ширина уровня $\hbar\tau_q^{-1}$ должна быть много меньше ϵ'_q), чтобы элементарные возбуждения можно было считать хорошо определенными и независимыми друг от друга.

Элементарные возбуждения часто разбивают [52] на две основные категории — *коллективные возбуждения* и *квази-частицы*, хотя эта классификация далеко не универсальна.

(Некоторые авторы, например Тер-Хаар [62], называют все элементарные возбуждения квазичастицами.) Коллективные возбуждения представляют собой кванты, связанные с коллективными движениями макроскопических групп частиц в системе, т. е. с движениями системы как целого. Примерами коллективных возбуждений могут служить:

1. *Фононы*. В периодических атомных структурах, таких, как кристалл, коллективные движения представляют собой звуковые волны. Соответствующие возбуждения, как уже обсуждалось выше, суть кванты звука или фононы.

2. *Плазмоны*. В электронном газе в металле возникают волнообразные флуктуации электронной плотности, подобные звуковым волнам. Они образуют приближенно независимые фиктивные тела, известные как „плазменные колебания“. Кванты этих колебаний представляют собой коллективные возбуждения; их называют плазмонами.

3. *Магноны*. В ферромагнетиках существуют регулярные флуктуации плотности спинового момента, называемые „спиновыми волнами“. Коллективные возбуждения в этом случае суть кванты спиновых волн, известные как магноны.

4. *Ядерные кванты*. В ядре происходят различные колебательные и вращательные движения. Связанные с ними кванты и представляют собой в данном случае коллективные возбуждения.

Коллективные возбуждения похожи на реальные частицы не более, чем волны на воде похожи на молекулы воды. Напротив, *квазичастицы* очень напоминают реальные частицы. Дело здесь, грубо говоря, в следующем: если одна частица движется через систему, она притягивает или расталкивает частицы вокруг себя и оказывается окруженной „облаком“ взбаламученных частиц, подобным облаку пыли от копыт скачущей лошади из ковбойского фильма. Реальная частица плюс связанное с ней облако и образуют квазичастицу. Как облако пыли скрывает лошадь, так и облако из частиц „экранирует“ реальную частицу, значительно ослабляя действие ее силового поля. Поэтому квазичастица только слабо взаимодействует с другими квазичастицами и может рассматриваться как почти независимая от них. Присутствие облака приводит также к различию свойств квазичастицы и реальной частицы, например квазичастица может иметь свою эффективную массу. [Следует отметить, что в квантовом случае частицы в облаке находятся в виртуальных энергетических состояниях. Дело в том, что при столкновениях между рассматриваемой частицей и другими частицами (т. е. при столкновениях, „встряхивающих“ облако) энергия, как

правило, не сохраняется; см. абзац после диаграммы (4.47). Несмотря на виртуальность состояний, само облако представляет собой физически реальный объект.] Вот некоторые примеры квазичастиц:

1. *Квазиэлектрон*. Электрон в электронном газе с однородным фоном положительного заряда отталкивает от себя другие электроны и, таким образом, оказывается окруженным положительным экранирующим облаком. Электрон плюс экранирующее облако и образуют квазиэлектрон. Эффективное взаимодействие между двумя квазиэлектронами — экранированное взаимодействие — более слабое (более короткодействующее), нежели первоначальное кулоновское взаимодействие.

2. *Полярон*. Электрон, двигаясь в непроводящем полярном кристалле, взаимодействует с ионами кристаллической решетки, смещая их из равновесных положений и приводя, таким образом, к локальному возбуждению звуковых волн, т. е. фононов. Полярон представляет собой электрон плюс облако фононов.

3. *Квазинуклон*. Несмотря на мощное короткодействующее взаимодействие между нуклонами в ядре, они ведут себя во многих отношениях так, как если бы они были независимы друг от друга (на это указывает успех оболочечной модели ядра). Почти независимыми частицами в данном случае являются не сами нуклоны, а нуклоны, окруженные облаками из других нуклонов, т. е. квазинуклоны.

4. *Электрон проводимости*. Электрон, взаимодействующий с периодическим полем фиксированных ионов решетки, не окружен облаком в том смысле, как об этом говорилось выше. Тем не менее влияние периодического поля может быть описано с помощью понятия эффективной массы, поэтому электроны проводимости можно рассматривать как некоторый простейший вид квазичастицы.

Имеется также небольшое число элементарных возбуждений, которые не очень легко укладываются в рамки нашей классификации, хотя их часто относят то к одной, то к другой категории. Один из примеров — это *экситон*, который представляет собой пару „связанный электрон + дырка“ и движется сквозь кристалл как водородоподобный „атом“. Его часто называют коллективным возбуждением. Другой пример — *боголон*, или „квазичастица Боголюбова“, представляющая собой линейную комбинацию электрона в состоянии $(+k, \uparrow)$ и „дырки“ в состоянии $(-k, \downarrow)$. Боголон — это элементарное возбуждение в сверхпроводнике. Возбуждения типа боголонов существуют также в некоторых четно-четных

ядрах, которые во многих отношениях напоминают сверхпроводники.

Важно отметить, что в физической системе может существовать более одного вида элементарных возбуждений. Например, в электронном газе в металлах имеются как квазиэлектроны, так и плазмоны, а в ядре одновременно существуют квазинуклоны и колебательные и вращательные коллективные возбуждения. Таким образом, в общем случае правую часть выражения (1.43) можно записать в виде

$$H' = E_0 + \underbrace{\sum_q \epsilon'_q A_q^\dagger A_q}_{\text{Квазичастицы}} + \underbrace{\sum_k \epsilon''_k B_k^\dagger B_k}_{\text{Коллективные возбуждения}} + \text{Малые члены.} \quad (1.44)$$

§ 4. Метод квантовой теории поля

Описание сильно взаимодействующей системы многих тел как совокупности приближенно независимых элементарных возбуждений над основным состоянием очень привлекательно своей простотой. Однако проблемы, действительно возникающие при определении энергий основного состояния и элементарных возбуждений, огромны. Метод канонических преобразований достаточно прост, когда речь идет о двух частицах или о фононах; он был даже с большим успехом использован и в некоторых гораздо более сложных случаях — достаточно вспомнить, например, развитую Бомом и Пайнсом теорию квазиэлектронов и плазмонов в электронном газе (см. [53]) или теорию коллективных возбуждений в ядре по Бору и Моттельсону (см. [64]). Но, как производить это преобразование в общем случае, рецепта не существует; поэтому применять метод часто бывает трудно.

Чего бы нам по существу хотелось — это найти систематический способ вычисления энергии основного состояния и энергий и времен жизни элементарных возбуждений. В серии революционизирующих работ, появившихся в 1955 — 1957 гг. (а также в некоторых более ранних, но менее известных работах), было показано, что квантовая теория поля, до сих пор ограниченная рамками только физики элементарных частиц, дает как раз такой систематический метод, который мы ищем. Она не только указывает единый способ вычисления энергии основного состояния и энергии и времен жизни квазичастиц, но и позволяет непосредственно вычислять многие другие характеристики системы. Дадим здесь общий обзор нового метода.

Роль главных героев в этом теоретико-полевом подходе к задаче многих тел играют *функции Грина*¹⁾ системы. В сущности, это обобщения обычных функций Грина, хорошо известных каждому старшекурснику. Они появляются в разных формах и размерах — одночастичные, двухчастичные, , n -частичные, опережающие, запаздывающие, причинные, для нулевой температуры, для конечной температуры, с действительным временем, с мнимым временем — широкий ассортимент для различных ситуаций и вкусов. Существует три главные причины такой популярности функций Грина в настоящее время:

1. Через них непосредственно выражаются важнейшие физические характеристики системы.

2. Они имеют простой физический смысл.

3. Их можно вычислять с помощью систематического метода, позволяющего опираться на физическую интуицию.

Возьмем, например, *одночастичную функцию Грина* $G(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$. Это есть амплитуда вероятности того, что если мы впустим частицу в точку \mathbf{r}_1 в момент времени t_1 и позволим ей некоторое время сталкиваться (взаимодействовать) с другими частицами, т. е. двигаться сквозь систему, то мы сможем снова наблюдать ее в момент t_2 в точке \mathbf{r}_2 . Функция Грина G непосредственно выдает энергии и времена жизни квазичастиц. Она позволяет также найти распределение частиц по импульсам, спинам, вычислить плотность частиц и сверх того используется при расчете энергии основного состояния. Все это возможно проделать и при отличной от нуля температуре с помощью температурного варианта функции G .

Двухчастичная функция Грина G_2 представляет собой амплитуду вероятности найти одну частицу в пространственно-временной точке \mathbf{r}_3, t_3 , другую — в точке \mathbf{r}_4, t_4 , если их впустили в точки \mathbf{r}_1, t_1 и \mathbf{r}_2, t_2 . У этой функции тоже много различных талантов. Она непосредственно дает энергии и времена жизни коллективных возбуждений, а также магнитную проницаемость, электрическое сопротивление и целый сонм других неравновесных характеристик как при нулевой, так и при отличной от нуля температуре.

Есть еще одна теоретико-полевая величина, называемая *вакуумной амплитудой*. Она играет менее существенную роль в теории многих тел, но тем не менее довольно важна.

¹⁾ Иногда вместо „функция Грина“ говорят „функция распространения“. Сам автор пользуется последним термином. В советской литературе первый термин более употребителен, поэтому при переводе мы использовали его. — *Прим. ред.*

Вакуумную амплитуду при нулевой температуре можно использовать для расчета энергии основного состояния, а ее тезка для конечных температур дает статистическую сумму большого канонического ансамбля, с помощью которой можно определить все равновесные характеристики системы.

Как же вычисляются функции Грина? Есть два эквивалентных способа. Первый из них состоит в решении цепочки дифференциальных уравнений, которым удовлетворяют эти функции. Одночастичная функция G_1 подчиняется дифференциальному уравнению, содержащему и неизвестную двухчастичную функцию G_2 ; в уравнение для G_2 входит G_3, \dots . Это означает, что мы вынуждены сражаться с „бесконечной иерархией“ зацепляющихся нелинейных дифференциальных уравнений. На практике мы обычно разрубам гордиев узел, делая какую-нибудь аппроксимацию для G_2 в первом уравнении и просто отбрасывая все остальные уравнения цепочки. Метод дифференциальных уравнений не будет обсуждаться в этой книге; тот, кто им интересуется, найдет соответствующие ссылки после гл. 14 в списке литературы для дальнейшего чтения.

Другой метод состоит в разложении функции Грина (или вакуумной амплитуды) в бесконечный ряд теории возмущений и в приближенном вычислении суммы этого ряда. Обычный способ вычисления — суммирование всех членов до второго или третьего порядка — неприменим для функции Грина, так как ряд сходится слишком медленно. Действительно, иногда оказывается, что все члены ряда бесконечны! Поэтому вместо обычной процедуры поступают так: суммируют члены определенного типа во всех порядках вплоть до бесконечного. Это называется *частичным* или *выборочным суммированием*. Новая теория возмущений бесконечного порядка радикально отличается от той, которой мы ежедневно пользуемся, и для ее применения требуется новая техника. Эта техника и есть метод *диаграмм Фейнмана*, который сейчас будет вкратце описан.

§ 5. Диаграммы Фейнмана и теория возмущения бесконечного порядка

Легко найти примеры из повседневной жизни, показывающие, каким образом диаграммы могут оказаться полезными при суммировании бесконечного ряда. Возьмем, например, простую геометрическую прогрессию

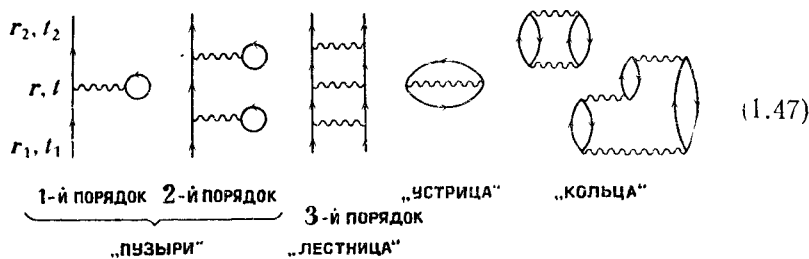
$$S = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \dots = 2. \quad (1.45)$$

Если представить каждый член ряда в виде прямоугольника с площадью, равной значению этого члена, то соотношение (1.45) можно изобразить в виде

$$S = \square + \square + \square + \square + \square + \dots = \square \quad (1.46)$$

Эта диаграммная форма имеет то преимущество, что она выявляет структуру ряда (1.45) таким „физическим“ образом, который делает процедуру суммирования очевидной даже десятилетнему ребенку.

Почти та же идея лежит и в основе фейнмановского диаграммного метода. В § 1 этой главы было показано, как можно разложить одночастичную функцию Грина в ряд теории возмущений, каждый член которого состоит из сложных цепочек различных сомножителей. Аналогично тому, как это было сделано выше, когда каждое число изображалось прямоугольником, в случае функции Грина каждый множитель представляется в виде прямой или волнистой линии. Это остается справедливым и для других теоретико-полевых величин, и на схеме (1.47), кроме „пузырей“ для одночастичной функции Грина, мы изобразили также некоторые характерные диаграммы, возникающие в разложениях теории возмущений для двухчастичной функции (например, „лестница“) и вакуумной амплитуды („устрица“ и „кольца“):



Подобно тому как каждый прямоугольник выявляет „структуру“ соответствующего члена прогрессии (1.45), так и каждая фейнмановская диаграмма делает понятной структуру того члена ряда, который она изображает. Однако в отличие от случая (1.46) размеры или форма диаграммы Фейнмана не имеют значения. Вместо этого (как и в случае электрических цепей) существенно лишь то, каким образом различные линии соединены друг с другом, т. е. важна топология диаграммы.

Именно эта топология и служит ключом к теории возмущений бесконечного порядка. После того как ряд теории возмущений записан в диаграммной форме, оказывается, что все диаграммы можно разделить на классы, каждый из которых характеризуется своей топологической структурой. Примерами классов служат хотя бы „пузырьковые“ диаграммы всех порядков или все „кольца“. По такому принципу и сгруппированы, в частности, диаграммы (1.47). Далее выясняется замечательный факт: диаграммы определенных классов (и, следовательно, члены ряда теории возмущений) можно легко просуммировать вплоть до бесконечного порядка. Например, можно найти сумму пузырьковых диаграмм всех порядков

$$G \approx \text{---} + \text{---}\text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\text{---}\text{---}\text{---} + \dots, \quad (1.48)$$

поскольку, как оказывается, члены ряда теории возмущений, соответствующие этим диаграммам, образуют простую геометрическую прогрессию. Это и есть частичное суммирование, упоминавшееся в конце предыдущего параграфа; оно приводит к аппроксимации нового типа для G , о которой там говорилось. Таким образом, ряды теории возмущений для различных функций Грина и вакуумной амплитуды удастся приближенно вычислить путем суммирования до бесконечного порядка некоторых типов диаграмм. Метод частичного суммирования составляет основу техники, которую мы будем применять на протяжении всей этой книги ¹⁾.

Кроме своей полезности как инструмента вычислений, фейнмановские диаграммы обладают и другими привлекательными чертами. Одна из них, уже отмечавшаяся в § 1, состоит в том, что диаграммы непосредственно выявляют физический смысл представляемых ими членов ряда теории возмущений, другая — в том, что они позволяют с первого взгляда установить смысл очень сложных аппроксимаций по тому, какой тип диаграмм был отсуммирован. Благодаря

¹⁾ Как можно показать, метод частичного суммирования сводится к разложению в ряд не самой функции Грина, а уравнения для нее. Этот прием типичен для многих приближенных методов, используемых не только в теории многих тел, но и, например, в теории нелинейных колебаний и т. д. — *Прим. ред.*

этому в физике появился новый язык, и часто можно встретить фразы вроде „лестничное приближение“ или „кольцевая аппроксимация“ даже в тех статьях, где нет никаких диаграмм. И, наконец, нельзя устоять перед живописным очарованием самих диаграмм. В их рядах, кроме уже упоминавшихся, находятся и такие персонажи, как „ожерелье“, „картошка“ и „головастик“ плюс бесчисленные множества других, еще не получивших имен. Коллектив, который они образуют, можно было в действительности назвать „теорией возмущений в смешных картинках“.

В следующих двух главах мы собираемся показать, как можно с помощью диаграмм вычислить функцию Грина для классической системы, содержащей только одну частицу, и для ее квантового аналога. Затем мы увидим, как та же техника позволяет найти энергию основного состояния и элементарных возмущений в системе многих тел.

Литература для дальнейшего чтения:

ТЕР-ХААР [62],
ПАТТЕРСОН [51],
ПАЙНС [53].

● Упражнения

1. Доказать соотношение коммутации (1.37a).
2. Убедиться в правильности соотношений (1.38).
3. Чему равно выражение $b_{q_2}^+ \Psi_{q_2}$?
4. Вывести соотношение (1.40в) из (1.40a) и (1.40б).
5. Чему равны выражения
 - а) $b_{q_2}^+ \Psi_{0_{q_1}, 3_{q_2}, 0_{q_3}, 0, 0, \dots}$
 - б) $b_{q_2} \Psi_{0_{q_1}, 0_{q_2}, 0, 0, \dots}$
 - в) $b_{q_1}^+ b_{q_2} b_{q_1}^+ \Psi_{1_{q_1}, 5_{q_2}, 0_{q_3}, 0, 0, \dots}$?
6. Сколько имеется фононов в состоянии атомной цепочки, описываемом волновой функцией $\Psi_{0_{q_1}, 0_{q_2}, 2_{q_3}, 0_{q_4}, 3_{q_5}, 0, 0, \dots}$?
7. Чему равна полная энергия системы в упражнении 6?

КЛАССИЧЕСКИЕ КВАЗИЧАСТИЦЫ И ФУНКЦИЯ ГРИНА ДЕТСКОГО БИЛЬЯРДА

§ 1. Физическая картина квазичастиц

Мы уже видели, что квазичастица — это один из типов элементарных возбуждений в системе многих тел; физически она представляет собой частицу, окруженную облаком других частиц. Эта точка зрения была проиллюстрирована различными примерами — от квазиэлектрона до квазилошади. Теперь мы собираемся более детально исследовать анатомию квазичастицы на примере типичного члена этого семейства — квазиона в классической жидкости. Затем мы определим функцию Грина для классической квазичастицы и покажем, как ее можно вычислить с помощью диаграмм, воспользовавшись методом частичного суммирования.

Представим себе классическую жидкость, образованную из равного количества положительных и отрицательных ионов, движущихся и сталкивающихся друг с другом (фиг. 3). Сосредоточим наше внимание на каком-нибудь типичном (+)-ионе. Из-за сильного кулоновского взаимодействия этот ион, двигаясь, притягивает к себе (-)-ионы. Некоторые из них на время приклеиваются к (+)-иону, затем благодаря столкновениям отлетают, заменяются другими (-)-ионами и т. д. Таким образом вследствие взаимодействия этот типичный (+)-ион [а следовательно, и любой (+)-ион] в среднем будет окружен „шубой“, или „облаком“ из (-)-ионов, как показано на фиг. 3 внутри пунктирных линий. Разумеется, каждый (-)-ион подобным же образом будет иметь шубу из (+)-ионов. Эта шуба из зарядов противоположного знака экранирует собственный заряд иона, в результате чего его взаимодействие с другими ионами — также заэкранированными — оказывается значительно более слабым, чем в отсутствие экранировки. Таким образом, ионы, одетые в шубы,

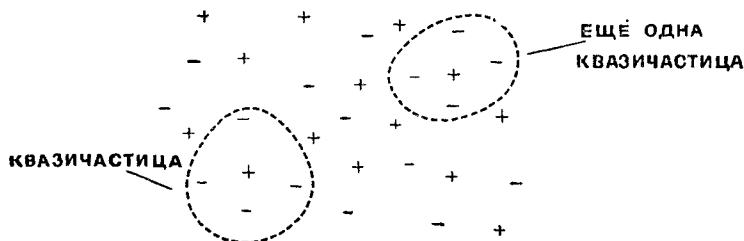
ведут себя почти независимо друг от друга и представляют собой квазичастицы в данной системе. Так же обстоит дело и во многих других системах взаимодействующих частиц; соответственно и в общем случае можем написать

$$\text{Реальная частица} + \begin{matrix} \text{„Шуба“, или „облако“} \\ \text{из других частиц} \end{matrix} = \text{Квазичастица} \quad (2.1)$$

Иногда это же соотношение записывается с помощью более мощной терминологии, заимствованной из квантовой теории поля:

$$\text{„Голая“ частица} + \begin{matrix} \text{„Шуба“, или} \\ \text{облако} \end{matrix} = \begin{matrix} \text{„Одетая“, или „физическая“, или} \\ \text{„перенормированная“ частица} \end{matrix} \quad (2.2)$$

Например, в квантовой электродинамике „голый“ электрон, взаимодействуя с фотонным полем, окружается облаком



Фиг. 3. Квазичастицы в жидкости, образованной из положительных и отрицательных ионов.

виртуальных фотонов и становится „одетым“. Равным образом и взаимодействие между реальными частицами называется „затравочным“, а о слабом взаимодействии между квазичастицами говорят как об „эффективном“ или „одетом“, или „перенормированном“ взаимодействии.

Будем теперь производить „мысленный“ расчет. Пусть преобразование (1.9) выполнено. Тогда мы увидим, что координата квазичастицы \mathbf{R}_i включает в себя координату реальной частицы \mathbf{r}_i плюс координаты \mathbf{r}_j ($j \neq i$) всех других частиц системы. Очевидно, переменные \mathbf{r}_j ($j \neq i$) будут описывать экранирующее облако, поэтому естественно называть облако частью квазичастицы.

Следует отметить, что каждая „голая“ частица представляет собой одновременно как „сердцевину“ квазичастицы, так и временный „член“ облака нескольких других квази-

частиц. Поэтому, желая представить себе всю систему как состоящую из квазичастиц, мы должны быть очень осторожны, так как при этом каждую частицу придется учитывать более одного раза. По этой причине понятие квазичастицы применимо только, если говорят одновременно о небольшом числе квазичастиц — небольшом по сравнению с полным числом частиц в системе. В гл. 8 мы покажем, что этот критерий справедлив также и в квантовом случае.

Имея перед глазами такую интуитивную картину, мы можем теперь составить себе представление о некоторых свойствах квазичастиц. Во-первых, в общем случае остается все же небольшое взаимодействие между квазичастицами. Его можно описать, вводя величину τ_p — среднее время жизни квазичастицы в состоянии с импульсом p , пока столкновение с другой квазичастицей не выбросит ее из этого состояния. Следовательно,

$$\text{Квазичастица имеет время жизни } \tau_p. \quad (2.3)$$

Чтобы приближение квазичастиц можно было считать хорошим, время жизни должно быть достаточно велико. Легко видеть также, что благодаря усредненной шубе из частиц квазичастица может иметь „эффективную“, или „перенормированную“, массу, которая отличается от массы реальной частицы. (Понятие эффективной массы, однако, применимо не всегда.) Это означает, что свободная квазичастица (т. е. квазичастица в отсутствие внешнего поля) обладает новым законом дисперсии

$$\epsilon' = \frac{p^2}{2m^*} \text{ вместо } \epsilon = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.4)$$

Разность

$$\epsilon_{\text{квазичаст}} - \epsilon_{\text{ист. част}} = \Delta\epsilon_{\text{собств}} \quad (2.5)$$

называется собственной энергией квазичастицы. Последнее выражение есть следствие того факта, что голая частица, взаимодействуя со средой, образует облако, а облако в свою очередь действует обратно на частицу, возмущая ее движение. Таким образом, частица в некотором смысле взаимодействует сама с собой через среду окружающих ее частиц. Этими представлениями о собственной энергии можно пользоваться даже в тех случаях, когда понятие эффективной массы неприменимо. Энергию и время жизни квазичастицы

можно найти с помощью одночастичной функции Грина, которой мы займемся в следующем параграфе. Примеры квазичастиц уже приводились в § 3 гл. 1.

§ 2. Функция Грина классической квазичастицы

Квазичастицы в системе можно описывать с помощью одночастичной функции Грина. Посмотрим, что она собой представляет в классическом случае. Пусть имеется система многих частиц; рассмотрим движение одной частицы под влиянием постоянной внешней силы \mathbf{F} , приложенной к системе, как показано на фиг. 1. Пусть движение начинается в точке \mathbf{r}_1 в момент времени t_1 . Если нет столкновений с другими частицами, то движение („распространение“) частицы к точке \mathbf{r}_2 , t_2 подчиняется уравнению

$$\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{F}}{m} \right) (t_2 - t_1)^2. \quad (2.6)$$

Если же между частицами есть взаимодействие, то появляются столкновения, и частица движется по очень неправильной траектории, не описываемой уравнением (2.6). Лучшее, что можно сделать в этой ситуации, это говорить о *вероятности* попадания частицы из одной точки в другую. Так мы приходим к определению *классической функции Грина*

$P(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ = Плотность вероятности (вероятность на единицу объема) того, что если частица в момент t_1 помещена в данную систему в точку \mathbf{r}_1 , то она будет найдена в точке \mathbf{r}_2 в более поздний момент времени t_2 . (2.7)

Для дальнейшего, когда мы будем пользоваться фурье-преобразованием, удобно определить P также и для $t_2 < t_1$:

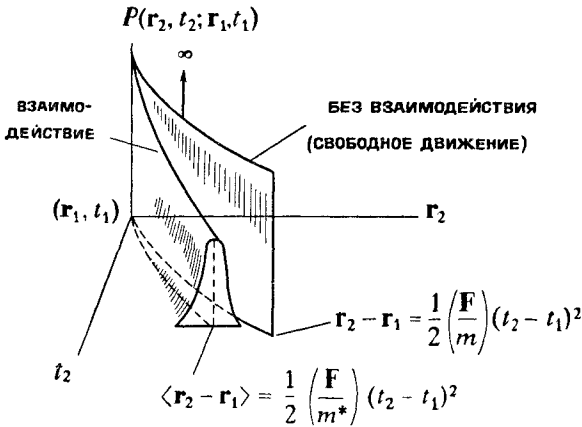
$$P(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = 0. \quad (2.8)$$

На фиг. 4 графически показана качественная картина поведения этой функции Грина в случаях с взаимодействием и без взаимодействия. Плотность вероятности отложена по вертикальной оси, а значения t_2 и произвольной компоненты координаты \mathbf{r}_2 — по горизонтальным осям. В отсутствие взаимодействия величина P изображается вертикальной поверхностью, т. е. равна нулю всюду, кроме линии $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \frac{1}{2} (\mathbf{F}/m) (t_2 - t_1)^2$, на которой она равна бесконечности. Иначе говоря, P есть δ -функция Дирака

$$P_0(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \delta \left[(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) - \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{F}}{m} \right) (t_2 - t_1)^2 \right]. \quad (2.9)$$

Это есть функция Грина в отсутствие взаимодействия — *свободная функция Грина*.

Включим теперь взаимодействие между частицами. Тогда, как качественно показано на фиг. 4, поверхность размоется.



Фиг. 4. Классическая функция Грина.

Схематически показано поведение только для одной компоненты координаты r_2 .

Проследим за величиной $\langle r_2 - r_1 \rangle$ — положением максимума функции P в системе с взаимодействием. Для некоторых типов взаимодействия окажется, что

$$\langle r_2 - r_1 \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{F}{m^*} \right) (t_2 - t_1)^2 \quad \text{для максимального значения } P. \quad (2.10)$$

Если это действительно так, то величина $\langle r_2 - r_1 \rangle$ ведет себя как координата квазичастицы с эффективной массой m^* . Рассмотрим теперь наибольшую высоту P как функцию t_2 . Из-за „размытия“ положения частицы значение $P_{\text{макс}}$ падает от ∞ при $t_2 = t_1$ сначала бесконечно быстро, а затем более медленно. Если это более медленное убывание имеет экспоненциальный вид

$$P_{\text{макс}}(r_2, t_2; r_1, t_1) \sim e^{-(t_2 - t_1)/\tau}, \quad (2.11)$$

то величину τ можно отождествить со временем жизни квазичастицы; очевидно, чтобы картина квазичастиц имела смысл, это время должно быть довольно большим. Таким образом,

если при вычислении функции P мы обнаруживаем, что она ведет себя, как указано выше, то это значит, что система может описываться в терминах квазичастиц, и можно определить их эффективную массу и время жизни.

§ 3. Вычисление функции Грина с помощью диаграмм

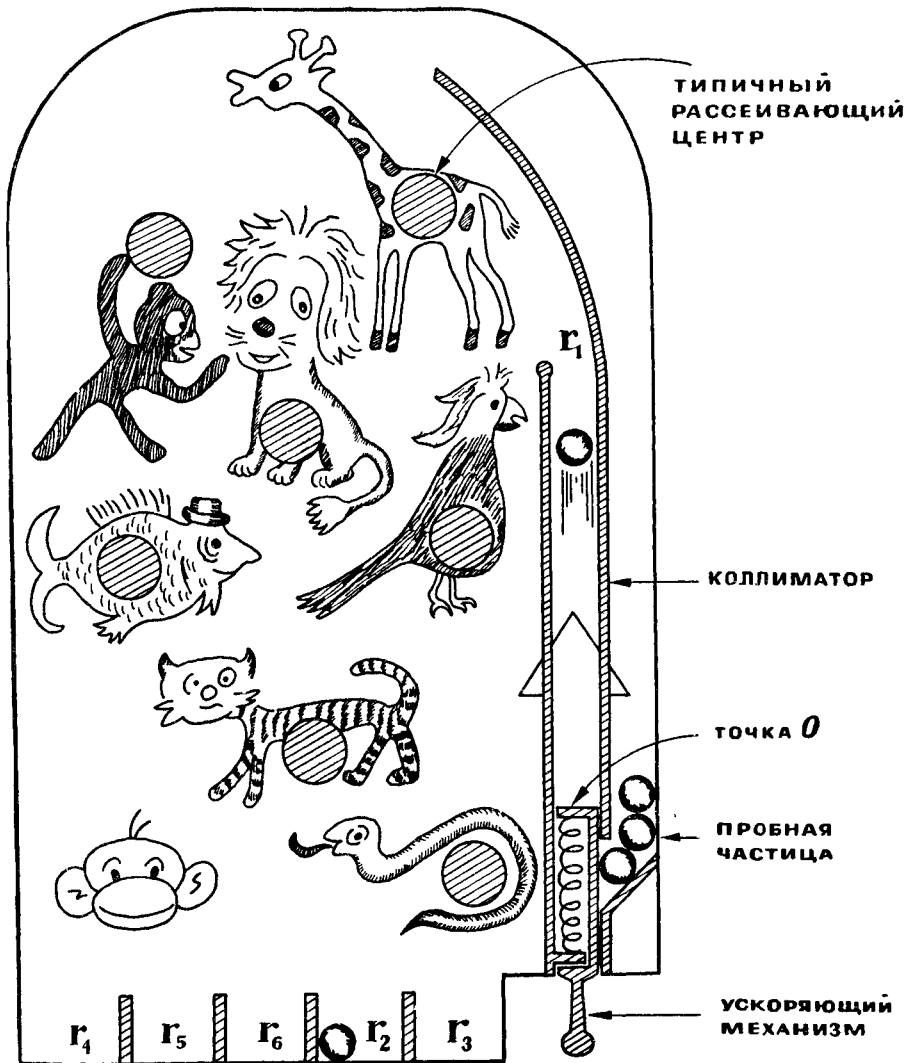
Фактический расчет функции Грина P очень сложен. Однако все основные принципы его легко проиллюстрировать на простом примере, в котором система многих тел заменена совокупностью фиксированных рассеивающихся центров.

Наш пример — это детский бильярд, изображенный на фиг. 5. Шарик выталкивается в точку \mathbf{r}_1 в момент времени t_1 и движется через систему, рассеиваясь на различных центрах. Мы ищем вероятность $P(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$ того, что шарик достигнет точки \mathbf{r}_2 в момент t_2 .

Механизм рассеяния предполагается таким, что 1) если шарик попадает на заштрихованный кружок животного A , то с вероятностью $P(A)$ он рассеивается, а с вероятностью $1 - P(A)$ проскакивает мимо, не рассеиваясь, и 2) распределение вероятностей траекторий и скоростей шарика после рассеяния на центре A не зависит от траектории и скорости до рассеяния, т. е. шарик теряет „память“ о том, как он попал в A .

[Есть много способов, с помощью которых можно приближенно удовлетворить этим требованиям. Например, заштрихованный кружок мог бы быть круглым колышком, который движется вверх — вниз и потому приподнят над поверхностью бильярда в течение доли времени $P(A)$ и находится вровень с поверхностью (т. е. не может служить преградой шарика) в течение остального времени. Или круглый колышек мог бы быть неподвижным, т. е. всегда выдвинутым наверх, и находиться где-то внутри заштрихованного кружка, при этом отношение его диаметра к диаметру кружка должно быть равно $P(A)$. Потери памяти можно добиться, приделав к каждому колышку „тасующее“ устройство, например, вроде быстро вращающегося зубчатого колесика. Выбор метода и необходимых деталей из детского конструктора представляется читателю в качестве упражнения. Для дальнейшего это не существенно!]

Простоты ради исключим для начала время из числа аргументов и рассмотрим просто величину $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ — вероятность того, что частица начнет двигаться из точки \mathbf{r}_1 и при-



Фиг. 5. Классический детский бильярд для иллюстрации одночастичной функции Грина и вакуумной амплитуды.

дет в точку \mathbf{r}_2 независимо от времени. По определению вероятности, $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ есть сумма вероятностей всех возможных траекторий шарика, который под действием пружины выходит из точки \mathbf{r}_1 и влетает в \mathbf{r}_2 . Шарик может, например, двигаться из \mathbf{r}_1 „прямо“ в \mathbf{r}_2 (т. е. не рассеиваться по дороге) или двигаться от точки \mathbf{r}_1 к жирафу, рассеиваться на нем и падать в \mathbf{r}_2 . Возможно также рассеяние с переходом от жирафа к обезьянке и снова в точку \mathbf{r}_2 . Или можно два раза рассеяться на жирафе, прежде чем попасть в точку \mathbf{r}_2 . И так далее.

Рассчитаем сначала вероятность того, что шарик пройдет сквозь систему по любой траектории. Пусть $P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$ есть вероятность того, что шарик выходит из точки \mathbf{r}_i и путешествует до \mathbf{r}_j , не рассеиваясь по дороге ни на одном из животных („свободная функция Грина“). Простейший путь шарика из \mathbf{r}_1 в \mathbf{r}_2 — без рассеяния [вероятность этого пути равна $P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$]. Другой путь — из \mathbf{r}_1 к жирафу в точку \mathbf{r}_G [вероятность $P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1)$], рассеяние на жирафе [вероятность $P(G)$] и затем свободное движение из \mathbf{r}_G в \mathbf{r}_2 [вероятность $P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G)$]. Поскольку при рассеянии в точке \mathbf{r}_G шарик теряет память, все эти вероятности независимы друг от друга, и суммарная вероятность всей траектории в точности равна произведению вероятностей каждой из ее частей:

$$\begin{aligned} P\{(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_G), (\text{рассеяние в } \mathbf{r}_G), (\mathbf{r}_G \rightarrow \mathbf{r}_2)\} = \\ = P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1) P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G). \end{aligned} \quad (2.12)$$

[Заметим, что процесс, при котором шарик движется из \mathbf{r}_1 в \mathbf{r}_G , не рассеивается в \mathbf{r}_G и продолжает двигаться в \mathbf{r}_2 , не включен в выражение (2.12); он учитывается в свободной функции Грина $P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$.] Вероятности других траекторий вычисляются подобным же образом.

Полная вероятность $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ равна сумме вероятностей различных траекторий. В результате находим

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = & P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1) P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G) + \\ & + P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_1) P(M) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_M) + \\ & + P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1) P(G) P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_G) P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G) + \dots, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где символ G отвечает жирафу, M — мартышке и т. д. То, что мы здесь получили, есть, очевидно, разложение функции Грина в ряд по возмущениям, а величины $P(A)$ играют ту же

роль, что и матричные элементы возмущения энергии V_{kl} в квантовомеханической теории.

На этот ряд, однако, трудно смотреть. Ключ к тому, как легче его прочитать, можно найти в журнале «Classic Comics», где сложные классические писатели переведены на язык картинок. Попробуем составить „словарь картинок“ и, таким образом, сопоставим диаграммы и различные вероятности (табл. 1).

Диаграммный словарь для функции Грина детского бильярда

Таблица 1 ◀

Слово	Диаграмма
$P(r_j, r_i)$	
$P_0(r_j, r_i)$	
$P(A)$	

Тогда ряд (2.13) можно представить в виде

$$\begin{array}{c} r_2 \\ \parallel \\ r_1 \end{array} = \begin{array}{c} r_2 \\ | \\ r_1 \end{array} + \begin{array}{c} r_2 \\ \uparrow \\ \textcircled{G} \\ \downarrow \\ r_1 \end{array} + \begin{array}{c} r_2 \\ \uparrow \\ \textcircled{M} \\ \downarrow \\ r_1 \end{array} + \dots + \begin{array}{c} r_2 \\ \uparrow \\ \textcircled{G} \\ \uparrow \\ r_1 \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \textcircled{M} \\ \downarrow \\ \textcircled{G} \\ \uparrow \\ r_1 \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \uparrow \\ \textcircled{G} \\ \uparrow \\ \textcircled{G} \\ \uparrow \\ \textcircled{G} \\ \uparrow \\ r_1 \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \textcircled{G} \\ \uparrow \\ \textcircled{L} \\ \uparrow \\ \textcircled{M} \\ \uparrow \\ r_1 \end{array} + \dots$$

(2.14)

Уравнения (2.14) и (2.13), конечно, полностью эквивалентны друг другу — одно переводится в другое с помощью словаря табл. 1. Но картинка обладает тем преимуществом, что она вскрывает физический смысл соотношения (2.13), непосредственно показывая, как частица выстреливается

из точки r_1 , испытывает различные столкновения и в конце концов попадает в точку r_2 . Перед нами предстает яркая и систематическая картина, из которой видно, что полная вероятность равна сумме вероятностей, связанных со всеми возможными путями или „историей“ движения частицы в системе. Заметим, что величины r_1 , r_2 , r_G , ... на диаграммах можно интерпретировать как точки в реальном пространстве, если перерисовать диаграммы так, чтобы эти точки располагались как и на фиг. 5:

The diagram shows an equation where a path from r_1 to r_2 is equal to the sum of several paths. On the left, a double line connects r_1 and r_2 . This is followed by an equals sign and a series of paths: a single line from r_1 to r_2 , a path from r_1 to a circle labeled G and then down to r_2 , a path from r_1 to a circle labeled M and then down to r_2 , and so on, with ellipses indicating further terms. On the right side of the equation, the paths are more complex: a path from r_1 to a circle labeled G with a self-loop, then down to r_2 ; a path from r_1 to a circle labeled M and then down to r_2 ; and a path from r_1 to a circle labeled G and then to a circle labeled M and finally down to r_2 . Ellipses follow the last path.

(2.15)

Важно обратить внимание на следующее: в переводе на язык диаграмм фраза „сумма вероятностей различных путей, по которым частица может прийти из точки r_1 в точку r_2 , взаимодействуя с различными рассеивателями“ звучит так: „сумма всевозможных различных диаграмм, состоящих из кружков с буквами посередине, соединенных сплошными линиями, которые начинаются в точке r_1 и кончаются в точке r_2 “. Действительно, существует только одна диаграмма, соответствующая каждому физическому пути частицы в системе.

Как же можно вычислить эту сумму? Если предположить, что величины P_0 большие, скажем $1/2$ или около того, а различные взаимодействия $P(A)$ слабые, например порядка $1/10$, то диаграммы более высокого порядка (под порядком мы имеем в виду полное число актов взаимодействия) будут давать последовательно меньший вклад, и, как и в обычной теории возмущений, мы можем получить приближенное решение, учитывая в ряде только члены первого или первого и второго порядков. Таким образом, приближение нулевого порядка соответствует невозмущенному случаю, когда частица свободно движется из точки r_1 в r_2 . Принимая во внимание возможность существования возмущающего взаимодействия с различными животными (рассеяния) — каждый раз только с одним — мы получаем приближение первого

порядка

$\begin{array}{c} \parallel \\ \uparrow \\ \downarrow \end{array} \approx \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \circlearrowleft G \\ \downarrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \circlearrowleft M \\ \downarrow \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \uparrow \\ \circlearrowleft L \\ \downarrow \end{array} \quad (2.16)$

Разрешив два взаимодействия, приходим к приближению второго порядка и т. д. Если же, с другой стороны, один или несколько членов взаимодействия $P(A)$ велики (т. е. рассеяние в точке A сильное), то этот метод становится практически неудобным, так как ряд сходится слишком медленно, и, чтобы получить хороший результат, надо суммировать члены вплоть до исключительно высоких порядков.

Существует, однако, другой способ аппроксимации, которым можно воспользоваться в случае сильного взаимодействия. При этом мы не ограничиваемся вторым порядком, а суммируем все диаграммы до бесконечного порядка. Предположим, например, что велика только вероятность $P(M)$, остальные же малы. Тогда диаграммы мартышки оказываются доминирующими, и ряд можно аппроксимировать суммой только таких повторяющихся диаграмм

$\begin{array}{c} \parallel \\ \uparrow \\ \downarrow \end{array} \approx \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \circlearrowleft M \\ \downarrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \circlearrowleft M \\ \uparrow \\ \circlearrowleft M \\ \downarrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \circlearrowleft M \\ \uparrow \\ \circlearrowleft M \\ \uparrow \\ \circlearrowleft M \\ \downarrow \end{array} + \dots \quad (2.17)$

Переведя каждый элемент диаграмм в нужную вероятность, легко записать и соответствующий ряд

$$P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \approx P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_1) P(M) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_M) + \\ + P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_1) P(M) P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_M) P(M) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_M) + \dots \quad (2.18)$$

Заметим теперь, что этот бесконечный ряд легко суммируется, ибо он представляет собой просто геометрическую прогрессию:

$$P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \approx P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_1) P(M) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_M) \times \\ \times [1 + P(M) P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_M) + P(M)^2 P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_M)^2 + \dots] = \\ = P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + \frac{P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_1) P(M) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_M)}{1 - P(M) P_0(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_M)} \quad (2.19)$$

Таким образом мы получили приближенное решение для гриновской функции $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$, которое годится и в случае сильного взаимодействия.




Эта новая аппроксимация, предполагающая суммирование ряда теории возмущений до бесконечного порядка по выбранному классу повторяющихся диаграмм (т. е. членов), называется *частичным* или *выборочным суммированием*. Она существенно отличается от обычной аппроксимации. Она лежит вне пределов привычной теории возмущений и может быть использована и в тех случаях, когда член взаимодействия велик и обычное приближение низших порядков не работает. Именно это качество и делает новую технику очень ценной там, где необходимо справиться с сильным взаимодействием, присущим задаче многих тел. Как будет вскоре показано, метод частичного суммирования лежит в основе расчета квантовомеханической функции Грина.

Описанная диаграммная техника легко обобщается и на зависящую от времени функцию Грина $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1)$ (мы написали $t_2 - t_1$, так как сила не зависит от времени и поэтому функции Грина могут зависеть только от разности времен). Пусть $P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, t_j - t_i)$ есть вероятность того, что частица выходит из точки \mathbf{r}_i в момент времени t_i и, ни с кем не взаимодействуя по пути, приходит в точку \mathbf{r}_j в момент t_j (это есть „свободная функция Грина“). Обозначим через $P(A)$ член взаимодействия, полагаемый для простоты не зависящим от времени. Тогда, считая, что время возрастает в положительном направлении оси y , мы можем составить новый диаграммный словарь (табл. 2), а ряд теории возмущений примет вид

$$\begin{array}{c}
 \mathbf{r}_2, t_2 \\
 \parallel \\
 \mathbf{r}_1, t_1
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 \mathbf{r}_2, t_2 \\
 | \\
 \mathbf{r}_1, t_1
 \end{array}
 +
 \begin{array}{c}
 \mathbf{r}_2, t_2 \\
 \uparrow \\
 \textcircled{G} \\
 \uparrow \\
 \mathbf{r}_G, t_G \\
 \uparrow \\
 \mathbf{r}_1, t_1
 \end{array}
 +
 \begin{array}{c}
 \mathbf{r}_2, t_2 \\
 \uparrow \\
 \textcircled{M} \\
 \uparrow \\
 \mathbf{r}_M, t_M \\
 \uparrow \\
 \mathbf{r}_1, t_1
 \end{array}
 + \dots +
 \begin{array}{c}
 \mathbf{r}_2, t_2 \\
 \uparrow \\
 \textcircled{G} \\
 \uparrow \\
 \mathbf{r}'_G, t'_G \\
 \uparrow \\
 \textcircled{G} \\
 \uparrow \\
 \mathbf{r}_G, t_G \\
 \uparrow \\
 \mathbf{r}_1, t_1
 \end{array}
 + \dots$$

(2.20)

[Подобно ряду (2.15), эти диаграммы можно, по крайней мере в одномерном случае, изобразить в координатной

Слово	Диаграмма
$P(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, t_j - t_i)$	
$P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, t_j - t_i)$	
$P(A)$	

системе, где переменная t играет роль ординаты, а r — роль абсциссы.] Выписывая теперь соответствующий ряд, необходимо помнить, что величина t_A может принимать все значения от t_1 до t_2 , поэтому каждая диаграмма в действительности изображает бесчисленное множество диаграмм с различными значениями t_A , и все их мы должны просуммировать. Иными словами, надо проинтегрировать по всем t_A . В результате получаем

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) &= P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) + \\
 &+ \int_{t_1}^{t_2} dt_G P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1, t_G - t_1) P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G, t_2 - t_G) + \\
 &+ \int dt_M \dots + \int \int + \dots + \int \int \int + \dots + \dots \quad (2.21)
 \end{aligned}$$

От неприятных интегралов, фигурирующих в этом выражении, можно избавиться, если обратить внимание на то, что они представляют собой „свертки“. С помощью преобразования Фурье их можно превратить в простые произведения. Определим фурье-трансформанту функции Грина $P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega)$ соотношением

$$P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, t_j - t_i) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t_j - t_i)} P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i, \omega) \quad (2.22)$$

[аналогично вводится и $P(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_l, \omega)$]. Тогда первые два члена в выражении (2.21) принимают вид

$$\begin{aligned}
 P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t_2-t_1)} P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega), \\
 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_G P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1, t_G - t_1) P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G, t_2 - t_G) &= \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt_G \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' e^{-i\omega'(t_G-t_1)} P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1, \omega') \right] \times \\
 &\times P(G) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t_2-t_G)} P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G, \omega) \right] = \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1, \omega') \times \\
 &\times P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G, \omega) e^{+i(\omega't_1 - \omega t_2)} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dt_G e^{-it_G(\omega' - \omega)}}_{2\pi\delta(\omega' - \omega)} = \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega(t_2-t_1)} P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1, \omega) P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G, \omega). \quad (2.23)
 \end{aligned}$$

[Отметим, что мы можем интегрировать по t_G от $-\infty$ до $+\infty$, так как условия (2.8) автоматически ограничивают интегрирование областью $t_1 < t_2$.] Проведя аналогичные выкладки для остальных членов и применив в конце обратное преобразование Фурье, получим

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega) &= \\
 &= P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \omega) + P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_1, \omega) P(G) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_G, \omega) + \dots \quad (2.24)
 \end{aligned}$$

Это не сложнее, чем ряд (2.13) для вероятности, не зависящей от времени. Точно так же, как и раньше, мы можем здесь использовать трюк с частичным суммированием. Таким образом, учет зависимости функции Грина от времени не создает особых трудностей. Заметим, что диаграммный ряд для фурье-трансформант можно получить и непосредственно, если воспользоваться переработанным изданием „словаря“, приведенного в табл. 2. В этом издании (табл. 3) диаграммы сопоставляются трансформантам функций Грина.

Слово	Диаграмма
$P(r_j, r_i, \omega)$	
$P_0(r_j, r_i, \omega)$	
$P(A)$	

Следовательно, все диаграммы для ряда (2.24) в точности такие же, как и в случае (2.20), — надо лишь стереть все аргументы t , заменив их на ω . Таким образом, имеем

$$\begin{array}{c} r_2 \\ \parallel \\ \omega \\ \parallel \\ r_1 \end{array} = \begin{array}{c} r_2 \\ | \\ \omega \\ | \\ r_1 \end{array} + \begin{array}{c} r_2 \\ | \\ \omega \\ \textcircled{G} \\ | \\ \omega \\ | \\ r_1 \end{array} + \begin{array}{c} r_2 \\ | \\ \omega \\ \textcircled{M} \\ | \\ \omega \\ | \\ r_1 \end{array} + \dots + \begin{array}{c} r_2 \\ | \\ \omega \\ \textcircled{G} \\ | \\ \omega \\ \textcircled{G} \\ | \\ \omega \\ | \\ r_1 \end{array} + \dots \quad (2.25)$$

Фактически мы не будем применять описанный метод для исследования классических квазичастиц — это увело бы нас слишком далеко в сторону. Вместо этого мы лучше перейдем непосредственно к квантовому случаю.

Упражнения ●

1. Выпишите диаграммный ряд для функции Грина $P(r_2, r_1)$, предполагая, что рассеяние как на мартышке, так и на льве велико, в то время как остальные взаимодействия слабы. Учтите все члены второго порядка и пару членов третьего порядка. Сколько всего диаграмм в n -м порядке?
2. Переведите несколько первых членов ряда из упражнения 1 на язык функций.
3. Вычислите указанную выше функцию Грина с помощью частичного суммирования, предполагая, что все величины $P_0(r_i, r_j) = c$.
4. Считая, что все $P_0(r_i, r_j) = c$, обобщите результаты предыдущих упражнений с учетом рассеяния на всех животных.

Глава 3

КВАНТОВЫЕ КВАЗИЧАСТИЦЫ И КВАНТОВАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА ДЕТСКОГО БИЛЬЯРДА

§ 1. Квантовомеханическая функция Грина

В этой главе мы рассмотрим простейшую из всех известных задач квантовой теории поля. Мы назовем ее задачей о квантовом „детском бильярде“, ибо она составляет точный квантовый аналог классического устройства, обсуждавшегося в предыдущей главе, и описывается диаграммным рядом точно того же вида, что и (2.25). Эта задача почти тривиальна, и ее можно решить в течение микросекунды, пользуясь элементарной квантовой механикой. С помощью диаграмм это делается немного дольше, но, как и их классические братья, о которых мы говорили в связи с фиг. 5, они обладают огромным достоинством, иллюстрируя все основные принципы и не заводя при этом читателя в трагину математики.

Начнем с определения квантовой функции Грина в общем случае, а затем покажем, что она собой представляет в случае свободных частиц и квазичастиц. Квантовым аналогом классической функции Грина (в предположении, что гамильтониан не зависит от времени и, следовательно, функция Грина зависит только от разности времен) служит выражение

$$\begin{aligned} iG(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1)_{t_2 > t_1} &= iG^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) = \\ &= \text{Амплитуда (плотности) вероятности того,} \\ &\text{что если в момент } t_1 \text{ в систему со взаимо-} \\ &\text{действием в основном состоянии добавлена} \\ &\text{частица в точку } \mathbf{r}_1, \text{ то в момент } t_2 \text{ система} \\ &\text{будет находиться в своем основном состоя-} \\ &\text{нии с добавленной частицей в точке } \mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Множитель i здесь поставлен из чисто декоративных соображений (так условились), а индекс „+“ означает, что $t_2 > t_1$. (Точное значение слова „добавленная“ обсуждается в § 2

гл. 9.) Использование амплитуды вероятности, а не просто вероятности составляет характерную черту квантовой механики [см. соотношение (3.26)]. Амплитуде вероятности (3.1) соответствует плотность вероятности

$$P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) = G^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1)^* G^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1).$$

Отметим, что в момент t_2 наблюдается не обязательно „та же самая“ частица; в системах тождественных частиц, с которыми мы обычно будем иметь дело, слова „та же самая“ не имеют смысла. Отметим также, что, кроме выражения „частица в точке \mathbf{r}_1 “, существует и более точное: „частица, волновая функция которой есть собственная функция оператора координаты $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ “.

Величина G^+ , определяемая равенством (3.1), называется „запаздывающей“ функцией Грина. По определению она равна нулю при $t_2 \leq t_1$. Существует также „опережающая“ функция Грина G^- , которая конечна при $t_2 \leq t_1$; это мы обсудим в гл. 4.

Фактически более удобно работать с функцией G , определенной эквивалентным образом через произвольные одночастичные собственные функции $\phi_k(\mathbf{r})$, а не через собственные функции оператора координаты. Тогда

$$iG^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = \text{Амплитуда вероятности того, что если в момент } t_1 \text{ в систему с взаимодействием в основном состоянии добавлена частица в состоянии } \phi_{k_1}(\mathbf{r}), \text{ то в момент } t_2 \text{ система будет находиться в своем основном состоянии с добавленной частицей в состоянии } \phi_{k_2}(\mathbf{r}). \tag{3.2}$$

При $t_2 \leq t_1$ по определению

$$iG^+(k_2, k_1, t_2 - t_1)_{t_2 \leq t_1} = 0. \tag{3.3}$$

В качестве $\phi_k(\mathbf{r})$ удобно выбрать собственные функции невозмущенного одночастичного гамильтониана $H(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i)$ [см. формулу (1.21)], который мы будем обозначать через H_0

$$H_0 = \frac{p_r^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2m} \nabla_r^2 + U(\mathbf{r}) \quad (\hbar = 1), \tag{3.4}$$

при этом

$$H_0 \phi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \phi_k(\mathbf{r}).$$

Если $U(\mathbf{r}) = 0$, то мы имеем случай свободной частицы

$$H_0 = -\frac{\nabla_r^2}{2m}, \quad \phi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \varepsilon_k = \frac{k^2}{2m}. \tag{3.5}$$

Здесь Ω — нормировочный объем. Мы будем обычно полагать $\hbar = 1$. Кроме того, для простоты мы здесь пренебрегли спином.

[Обратите внимание на обозначение: в выражении (3.4) индекс k (k_1, k_2 и т. д.) обозначает всевозможные квантовые числа, необходимые для определения произвольной собственной функции гамильтониана. Определенные собственные функции будут отмечаться индексами p , например $\phi_{p_1}(\mathbf{r})$, $\phi_{p_2}(\mathbf{r})$, $\phi_{p_3}(\mathbf{r})$, ... или для краткости $\phi_1(\mathbf{r})$, $\phi_2(\mathbf{r})$, ... (последовательность функций — приблизительно в порядке возрастания энергии). В частном случае, когда $U(\mathbf{r}) = 0$, k есть волновой вектор, и мы будем писать k (или k, σ , если учитывается спин).]

Определение (3.2) описывает „распространение“ частицы из состояния $\phi_{k_1}(\mathbf{r})$ в состояние $\phi_{k_2}(\mathbf{r})$. Заметим, что если $k_1 = k_2$, то частица распространяется только во времени.

Вычислим сначала свободную функцию Грина G_0^+ (никаких возмущений нет). Пусть в момент времени t_1 волновая функция свободной частицы есть $\phi_{k_1}(\mathbf{r})$. Тогда

$$\psi(\mathbf{r}, t_1) = \phi_{k_1}(\mathbf{r}). \quad (3.6)$$

Согласно уравнению Шредингера, зависящему от времени, в более поздний момент времени t_2 волновая функция будет иметь вид

$$\psi(\mathbf{r}, t_2) = \phi_{k_1}(\mathbf{r}) e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2 - t_1)}, \quad (3.7)$$

где ε_{k_1} — одночастичная энергия, фигурирующая в уравнении (3.4). Таким образом, амплитуда вероятности того, что частица в момент t_2 находится в состоянии ϕ_{k_2} , равна просто компоненте $\psi(\mathbf{r}, t_2)$ вдоль ϕ_{k_2} , т. е.

$$\int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t_2) \phi_{k_2}^*(\mathbf{r}) = e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2 - t_1)} \underbrace{\int d^3\mathbf{r} \phi_{k_1}(\mathbf{r}) \phi_{k_2}^*(\mathbf{r})}_{\delta_{k_2 k_1}}. \quad (3.8)$$

Отсюда по определению функции G_0^{+1})

$$\begin{aligned} G_0^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) &= -i\theta_{t_2 - t_1} e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2 - t_1)} \delta_{k_2 k_1} = \\ &= \delta_{k_2 k_1} G_0^+(k_1, t_2 - t_1), \end{aligned} \quad (3.9)$$

1) Отметим, что для фермионов все уровни ниже энергии Ферми ε_F (см. стр. 71–73) заполнены, поэтому „распространяться“ может только частица с $\varepsilon_{k_1} > \varepsilon_F$.

где

$$G_0^+(k, t_2 - t_1) = \begin{cases} (-i)\theta_{t_2-t_1} e^{-i\varepsilon_k(t_2-t_1)} & \text{для } t_2 \neq t_1, \\ 0 & \text{для } t_2 = t_1 \end{cases} \quad (3.10)$$

и

$$\theta_{t_2-t_1} = \begin{cases} 1, & \text{если } t_2 > t_1, \\ 0, & \text{если } t_2 < t_1. \end{cases} \quad (3.11)$$

Множитель $\theta_{t_2-t_1}$ учитывает тот факт, что по определению (3.3) $G^+ = 0$ при $t_2 < t_1$. Отметим также, что в соответствии с (3.3) $G_0^+ = 0$ и при $t_2 = t_1$.

Как и в случае функции Грина классического детского бильярда, нам удобно работать с фурье-трансформантой выражения (3.10), т. е. с функцией

$$\begin{aligned} G_0^+(k, \omega) &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t_2 - t_1) \theta_{t_2-t_1} e^{i\omega(t_2-t_1)} e^{-i\varepsilon_k(t_2-t_1)} = \\ &= (-1) \frac{e^{i(\omega-\varepsilon_k)(t_2-t_1)}}{\omega - \varepsilon_k} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k} - \frac{e^{i(\omega-\varepsilon_k)\infty}}{\omega - \varepsilon_k}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Из-за экспоненты, осциллирующей на бесконечности, эта функция недостаточно хорошо определена. Одна из уловок, с помощью которой можно обойти эту трудность, состоит в добавлении к аргументу ω в экспоненте члена $i\delta$, где δ — положительное, бесконечно малое число, причем $\delta \times \infty = \infty$. В результате член $e^{i\infty}$ стремится к нулю, и мы получаем

$$G_0^+(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\delta} - \frac{e^{i(\omega+i\delta-\varepsilon_k)\infty}}{\omega - \varepsilon_k + i\delta} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\delta}. \quad (3.13)$$

Обычным оправданием этой процедуры служит тот факт, что, переходя к фурье-трансформанте $G_0^+(k, \omega)$, мы снова получаем как раз $G_0^+(k, t)$ (см. приложение I). (Более строгий анализ требует привлечения „обобщенных функций“ или „распределений“.) Следует отметить, что, хотя член $i\delta$ принципиально важен для деталей реального расчета, наши расчеты будут либо слишком простыми, либо слишком поверхностными, чтобы стоило о нем беспокоиться.

Видно, что фурье-трансформанта свободной функции Грина имеет полюс при (т. е. бесконечно близко к) $\omega = \varepsilon_k$ — энергии частицы, добавленной в состоянии ϕ_k . Это оказывается

довольно общим свойством; действительно, можно показать (см. приложение VIII), что

Полюсы $G^+(k, l, \omega)$ — фурье-трансформанты одночастичной функции Грина — появляются при значениях ω , равных разности энергий возбужденных состояний системы из $N + 1$ взаимодействующих частиц и энергии основного состояния системы из N взаимодействующих частиц. (3.14)

Этим свойством и объясняется необыкновенная важность функции Грина в теории многих тел.

Обратимся теперь к функции Грина при наличии взаимодействия. Аналогично классическому случаю, обсуждавшемуся в гл. 2, квантовые квазичастицы ведут себя подобно свободным частицам, за исключением того, что они обладают новой энергией ϵ'_k вместо ϵ_k и временем жизни τ_k . Поэтому мы ожидаем, что, если добавленная частица ведет себя как квазичастица, одночастичная функция Грина будет иметь тот же вид, как и свободная функция Грина, с заменой ϵ_k на ϵ'_k и введением экспоненциально затухающего множителя с постоянной времени τ_k

$$G_{\text{квазичаст}}^+(k, t_2 - t_1) = -ie^{-i\epsilon'_k(t_2 - t_1)}e^{-(t_2 - t_1)/\tau_k}. \quad (3.15)$$

(Более общее выражение обсуждается в гл. 8.) Этой функции соответствует фурье-трансформанта

$$G_{\text{квазичаст}}^+(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon'_k + i\tau_k^{-1}}. \quad (3.16)$$

Очевидно, для того чтобы эти выражения имели смысл, время жизни квазичастиц должно быть велико, а ширина энергетических уровней τ_k^{-1} [см. абзац после формулы (1.43)] — мала по сравнению с самими значениями энергии

$$\tau_k^{-1} \ll \epsilon'_k. \quad (3.17)$$

[Более точные условия для τ_k определяются неравенством (8.21).]

Таким образом, если найдена функция G^+ и она имеет такой вид, как указывалось выше, то систему можно описывать в рамках простой картины квазичастиц. Таким системам присвоен титул „нормальных“. С другой стороны, даже если оказывается, что система принадлежит к менее распространенной „аномальной“ разновидности, когда формула (3.16) несправедлива [как, например, одночастичная система, описываемая соотношением (4.39), или сверхпроводящая система в гл. 15], мы все еще можем вычислять энергии возбужденных состояний по правилу (3.14).

В случае нормальных систем по-прежнему можно связывать полюсы квазичастичной функции Грина (3.16) с энергиями возбужденных состояний системы [как в (3.14)], рассматривая энергию как комплексную величину с действительной частью ϵ'_k и (малой) мнимой частью $-i\tau_k^{-1}$:

$$\omega_{\text{полюс}} = \epsilon'_k - i\tau_k^{-1}. \quad (3.18)$$

Комплексные энергии такого же типа мы встречаем и в случае атома в возбужденном состоянии ϕ_n с энергией ϵ_n . В отсутствие взаимодействия с другими атомами или с излучением волновая функция атома имеет вид

$$\psi_n(t) = \phi_n e^{-i\epsilon_n t}. \quad (3.18a)$$

Если включить слабое взаимодействие, возникает сдвиг энергии (которая становится равной ϵ'_n) и, кроме того, состояние атома начинает меняться (состояние ϕ_n начинает затухать). Таким образом, волновую функцию приближенно можно записать в виде

$$\psi'_n(t) \approx \phi_n e^{-i\epsilon'_n t} e^{-t/\tau_n} = \phi_n e^{-i(\epsilon'_n - i\tau_n^{-1})t}, \quad (3.18б)$$

что как раз совпадает с выражением (3.18a), если заменить там действительную энергию ϵ_n комплексной $\epsilon'_n - i\tau_n^{-1}$.

§ 2. Квантовый детский бильярд

Для иллюстрации принципов теории мы вычислим теперь функцию Грина простой системы, состоящей из одной частицы в присутствии внешнего возмущения, сохраняющего импульс. Эта система представляет собой точный квантовый аналог детского бильярда. Разумеется, в системе из одной частицы не могут существовать квазичастицы в смысле „реальная частица плюс облако из других частиц“. Однако, как уже говорилось в § 3 гл. 1 в связи с электронами проводимости, мы можем довольно свободно рассматривать частицу как одетую самим внешним возмущающим потенциалом.

В квантовом детском бильярде единственная свободная частица подвергается действию одновременно двух возмущающих потенциалов V_M и V_L — аналогов двух различных животных — рассеивателей в классическом бильярде. Невозмущенные гамильтониан, волновые функции и энергии определяются выражениями (3.5). В качестве возмущения выберем потенциал, зависящий от скорости и:

$$V(\mathbf{p}) = V_M + V_L = Mp^2 + Lp^4 = -MV_r^2 + LV_r^4. \quad (3.19)$$

Здесь M и L — действительные константы; предполагается, что $M \gg L$.

Этот странный „потенциал“, выбранный нами из-за его необыкновенной математической простоты, может травмировать некоторых читателей. Конечно, он не из тех потенциалов, с которыми встречаешься на улице и которые в большинстве случаев имеют знакомый вид $V(\mathbf{r})$. Тем не менее довольно легко искусственно построить возмущение вида (3.19). Например, гамильтониан, описывающий движение центра инерции свободного атома водорода, есть $H = p^2/(m + m_e)$, где m — масса протона, а m_e — масса электрона. Его можно представить в виде суммы

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{m_e}{(m_e + m)m} p^2$$

и рассматривать второй член ее, как если бы это был „возмущающий потенциал“. Подобным же образом член с p^4 может появиться как релятивистская поправка при разложении релятивистского гамильтониана

$$H = (m_0^2 c^4 + p^2 c^2)^{1/2} \approx m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2}.$$

Действительно, если считать, что это есть гамильтониан центра инерции свободного атома водорода с $m_0 = m + m_e$, то

$$H \approx (m + m_e) c^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{m_e}{(m_e + m)m} p^2 - \frac{p^4}{8(m + m_e)^3 c^2}.$$

За исключением несущественного постоянного члена, это выражение как раз имеет вид (3.19). Зависящие от скорости потенциалы действительно появляются в задаче об электроде в магнитном поле ($V \sim \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$) и в ядерной физике.

Проблема теперь состоит в вычислении энергии свободной частицы, подвергающейся действию возмущения $V(\mathbf{p})$.

Рассмотрим сначала обычное, общепринятое решение. Так как $M \gg L$, мы можем в качестве первого шага пренебречь членом $\sim L$. Тогда $V(\mathbf{p}) \approx M p^2$ и

$$H \approx \frac{p^2}{2m} + M p^2. \quad (3.20)$$

Поскольку возмущение имеет тот же вид, что и невозмущенный гамильтониан $H_0 = p^2/2m$, возмущенные волновые функции совпадают с прежними ϕ_k , а новая энергия есть

$$\epsilon'_k = \left(\frac{1}{2m} + M \right) k^2. \quad (3.21)$$

Для сравнения с выражением (1.21) этот результат можно получить путем тривиального „канонического преобразования“

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{H_0} + \underbrace{Mp^2}_{H_1} \rightarrow H' = \underbrace{\left(\frac{1}{2m} + M\right)}_{H'_0} p^2 + \underbrace{0}_{H'_1}. \quad (3.22)$$

Таким образом, можно считать, что гамильтониан H'_0 описывает зачаточные „квазичастицы“ с видоизмененным законом дисперсии (3.21). [В этом простом примере „фиктивные тела“ из соотношения (1.21) и квазичастицы (1.43) представляют собой одно и то же.]

Посмотрим теперь, как повлияет добавление члена $\sim L$. Собственные функции остаются теми же, что и для H_0 , и мы получаем

$$LV^4\phi_k = Lk^4\phi_k. \quad (3.23)$$

Отсюда следует, что полная энергия частицы есть

$$e''_k = \left(\frac{1}{2m} + M\right)k^2 + Lk^4. \quad (3.24)$$

Решим теперь ту же тривиальную задачу с помощью одночастичной функции Грина и посмотрим, как можно получить энергии „квазичастицы“ e'_k и e''_k из полюсов функции Грина. Для этого требуется сначала построить для функции Грина ряд теории возмущений, аналогичный ряду (2.21) в случае классического детского бильярда. Мы получим его из таких же физически интуитивных соображений, как и в классическом случае. (Строгий математический вывод приведен в § 4 этой главы.)

В соответствии с инструкциями, данными в определении функции Грина, в момент t_1 частица вводится в систему (в данном случае — первоначально пустую) в состоянии $\phi_{k_1}(\mathbf{r}) = \Omega^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})$ и распространяется сквозь систему, рассеиваясь нуль, один или более раз на внешних потенциалах

$$V_M = Mp^2 \quad \text{или} \quad V_L = Lp^4. \quad (3.25)$$

По определению (3.2) функция Грина $iG^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1)$ есть как раз амплитуда вероятности того, что частица в момент t_2 окажется в состоянии $\phi_{k_2}(\mathbf{r}) = \Omega^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r})$. Аналогично рассеянию на животных, амплитуда iG^+ равна сумме амплитуд вероятностей для всех возможных путей движения частицы по системе из состояния ϕ_{k_1} в состояние ϕ_{k_2} .

[Знакомый пример этого — переход атома или атомного ядра из состояния i в состояние f при испускании фотона. Пусть прямой переход $i \rightarrow f$ запрещен, но атом может релаксировать через промежуточные состояния l или m . Тогда полная амплитуда вероятности перехода есть амплитуда перехода $(i \rightarrow l \rightarrow f)$ плюс амплитуда $(i \rightarrow m \rightarrow f)$. Заметим, что

$$\begin{aligned} & \text{Полная вероятность } (i \rightarrow f) = \\ & = | \text{Амплитуда } (i \rightarrow l \rightarrow f) + \text{Амплитуда } (i \rightarrow m \rightarrow f) |^2 \neq \\ & \neq \text{Вероятность } (i \rightarrow l \rightarrow f) + \text{Вероятность } (i \rightarrow m \rightarrow f); \end{aligned} \quad (3.26)$$

см. также [19].]

Простейший способ распространения частицы в системе — это свободное движение без взаимодействия. Амплитуда вероятности этого процесса равна как раз свободной функции Грина $i\delta_{k_1 k_2} G_0^+(\mathbf{k}_1, t_2 - t_1)$, такой же, как и в выражениях (3.9), (3.10). Другой путь — попасть в момент t_1 в состоянии ϕ_{k_1} , в момент t_M рассеяться потенциалом V_M , перейдя при этом в состояние ϕ_{k_2} , и затем свободно двигаться в этом состоянии вплоть до момента времени t_2 . [Может показаться странным, что мы говорим о рассеянии частицы потенциалом V_M в момент t_M или о рассеянии частицы данным потенциалом несколько раз, хотя на самом деле потенциал присутствует все время. Это, однако, есть просто результат того факта, что, строя ряд теории возмущений, мы фактически разлагаем полную функцию Грина на примитивные компоненты, каждая из которых описывает мгновенное рассеяние на потенциале. В конце мы интегрируем по всем временам, как показано в (3.28), и суммируем по всем последовательностям процессов рассеяния, как в (3.30), и таким образом снова „собираем функцию Грина воедино“.] Для этого второго пути амплитуда вероятности будет равна по аналогии со случаем классического детского бильярда произведению амплитуд независимых процессов, которые происходят на данном пути. (В независимости этих процессов можно убедиться, замечая, что частицу, рассеянную из состояния ϕ_l в состояние ϕ_k , нельзя отличить от частицы, перешедшей в ϕ_k из другого состояния ϕ_l . Иными словами, частица в состоянии ϕ_k „не помнит“ каким образом она туда попала — как и в классическом детском бильярде.)

Первому из указанных независимых процессов — свободному движению в состоянии ϕ_{k_1} от t_1 до t_M соответствует амплитуда $iG_0^+(k_1, t_M - t_1)$, вычисляемая по формуле (3.10). Амплитуду второго процесса — рассеяния в момент t_M на

потенциале V_M с переходом из состояния ϕ_{k_1} в состояние ϕ_{k_2} — можно вычислить по обычной нестационарной теории возмущений следующим образом. Пусть c_l есть амплитуда вероятности того, что в момент t_0 система находится в состоянии ϕ_l . Тогда в более поздний момент времени t скорость изменения какой-нибудь определенной величины c_l , скажем c_p , под влиянием возмущения V будет равна

$$\dot{c}_p(t) = -i \sum_l V_{pl} c_l e^{i(\epsilon_p - \epsilon_l)(t - t_0)},$$

где V_{pl} — матричный элемент V между состояниями ϕ_p и ϕ_l [см., например, в работе [13] соотношение (14—57) при $\hbar = 1$]. В рассматриваемом процессе при $t_0 = t_M$ система определенно находится в состоянии ϕ_{k_1} , поэтому $c_l = \delta_{lk_1}$. Возмущающий потенциал $V = V_M$. Следовательно, отнесенная к единице времени амплитуда вероятности перехода из ϕ_{k_1} в $\phi_p = \phi_{k_2}$ в момент t_M (t здесь также равно t_M) есть

$$\begin{aligned} \dot{c}_{k_2}(t = t_M) &= -i V_{M_{k_2 k_1}} = -i \int d^3 \mathbf{r} \phi_{k_2}^*(\mathbf{r}) V_M \phi_{k_1}(\mathbf{r}) = \\ &= +i M \int d^3 \mathbf{r} \phi_{k_2}^* \nabla^2 \phi_{k_1} = -i M k_1^2 \delta_{k_2 k_1}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Множитель $\delta_{k_2 k_1}$ указывает на сохранение импульса в процессе рассеяния. Амплитуда последнего процесса есть $iG_0^+(\mathbf{k}_2, t_2 - t_M)$. Полная амплитуда равна свертке

$$\left[\begin{array}{l} \text{Амплитуда} \\ \text{вероятности} \end{array} \right]_{t_1 \rightarrow t_M \rightarrow t_2} = i \int_{-\infty}^{+\infty} dt_M G_0^+(\mathbf{k}_1, t_M - t_1) V_{M_{k_2 k_1}} G_0^+(\mathbf{k}_2, t_2 - t_M). \quad (3.28)$$

Рассеяние на потенциале V_M могло бы произойти в любой промежуточный момент времени $t_1 < t_M < t_2$, почему мы и проинтегрировали по t_M . Отметим, что θ -функция в G_0^+ [см. (3.10)] автоматически ограничивает область интегрирования интервалом $t_1 < t_M < t_2$.

Равным образом может произойти и взаимодействие с V_L . Оно описывается матричным элементом

$$-i V_{L_{k_2 k_1}} = -i L k_1^4 \delta_{k_2 k_1}, \quad (3.29)$$

также сохраняющим импульс. Есть еще процессы второго и более высокого порядка, в которых частица „сталкивается“ с V_M и V_L любое число раз. В результате получаем (после

сокращения на i) следующий ряд для функции Грина:

$$\begin{aligned}
 G^+(\mathbf{k}, t_2 - t_1) &= G_0^+(\mathbf{k}, t_2 - t_1) + \\
 &+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt_M G_0^+(\mathbf{k}, t_M - t_1) V_{M_{kk}} G_0^+(\mathbf{k}, t_2 - t_M) + \\
 &+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt_L G_0^+(\mathbf{k}, t_L - t_1) V_{L_{kk}} G_0^+(\mathbf{k}, t_2 - t_L) + \\
 &+ \int dt_M dt'_M \dots + \int dt_M dt_L \dots + \dots + \\
 &+ \int dt_M dt'_M dt''_M \dots + \dots
 \end{aligned} \tag{3.30}$$





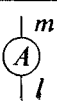

(мы положили здесь $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$, так как импульс сохраняется).

Так же как и в случае классического детского бильярда, в этом ряду можно избавиться от интегралов, переходя к фурье-трансформантам. Тогда, подобно (2.24), имеем

$$\begin{aligned}
 G^+(\mathbf{k}, \omega) &= G_0^+(\mathbf{k}, \omega) + [G_0^+(\mathbf{k}, \omega)]^2 V_{M_{kk}} + [G_0^+(\mathbf{k}, \omega)]^2 V_{L_{kk}} + \\
 &+ [G_0^+]^3 V_{M_{kk}}^2 + 2[G_0^+]^3 V_{M_{kk}} V_{L_{kk}} + [G_0^+]^3 V_{L_{kk}}^2 + \\
 &+ [G_0^+]^4 V_M^3 + \dots
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

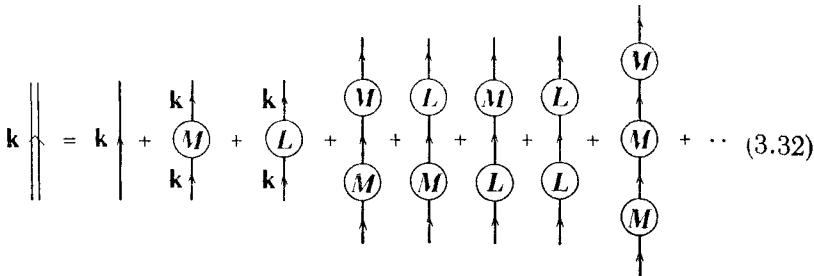
Воспользуемся теперь тем же трюком, что и в классическом случае, и составим словарь для перевода рядов на язык диаграмм. Прimitивные диаграммы показаны в табл. 4. Сравните ее с табл. 2 для (\mathbf{r}, t) -пространства и с табл. 3

► *Диаграммный словарь для квантовой функции Грина детского бильярда* Таблица 4

(\mathbf{k}, t)-пространство		(\mathbf{k}, ω)-пространство	
Слово	Диаграмма	Слово	Диаграмма
$iG^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1)$		$iG^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \omega)$	
$iG_0^+(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \theta_{t_2 - t_1} e^{-i\varepsilon_k(t_2 - t_1)}$		$iG_0^+(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i}{\omega - \varepsilon_k + i\delta}$	
$-iV_{Ami}$		$-iV_{Ami}$	

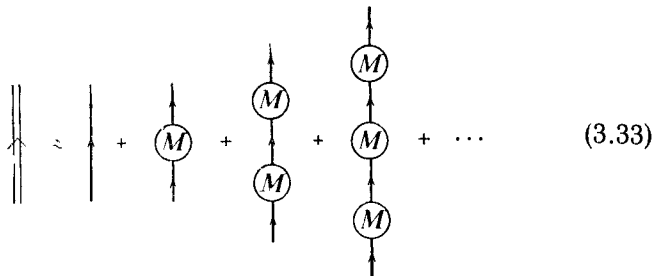
для (\mathbf{r}, ω) -пространства! [Соотношения (3.30), (3.31) также можно записать в переменных (\mathbf{r}, t) или (\mathbf{r}, ω) , но в данном случае пользы от этого было бы слишком мало.]

С помощью вновь составленного словаря легко записать диаграммный ряд, соответствующий выражениям (3.30) и (3.31),



Линиям здесь можно приписать либо индексы t — для ряда (3.30), либо индексы ω — в случае ряда (3.31). Очевидно, в данном случае это есть сумма всех возможных различных диаграмм.

Далее, поскольку мы предположили, что $M \gg L$, всеми взаимодействиями с V_L можно пренебречь и тогда ряд (3.32) приближенно запишется в виде



Это есть точный аналог частичной суммы по всем мартышкиным диаграммам (2.17). Как и в том случае, суммирование легко осуществляется, так как ряд опять представляет собой геометрическую прогрессию. Переводя диаграммы (3.33) на язык слов с помощью табл. 4 [в переменных (\mathbf{k}, ω)], сокращая на i и опуская для краткости аргументы, находим

$$\begin{aligned}
 G^+(\mathbf{k}, \omega) &\approx G^+ + (G_0^+)^2 V_{M_{kk}} + (G_0^+)^3 V_{M_{kk}}^2 + \dots = \\
 &= G_0^+ \left[1 + G_0^+ V_{M_{kk}} + (G_0^+)^2 V_{M_{kk}}^2 + \dots \right] = \\
 &= \frac{G_0^+}{1 - G_0^+ V_{M_{kk}}} = \frac{1}{(G_0^+)^{-1} - V_{M_{kk}}} \quad \text{для } |G_0^+ V_{M_{kk}}| < 1. \quad (3.34)
 \end{aligned}$$

Этот же результат удобно получить, значительно сэкономив чернила, путем манипулирования с самими диаграммами, что вполне законно, ибо в (\mathbf{k}, ω) -пространстве каждой части диаграммы соответствует некоторый множитель. Так, равенство (3.34) можно переписать в виде

$$\begin{aligned}
 \uparrow\uparrow &\approx \uparrow + \uparrow \times \textcircled{M} + \uparrow \times \textcircled{M}^2 + \uparrow \times \textcircled{M}^3 + \dots = \\
 &= \uparrow \times \left[1 + \textcircled{M} + \textcircled{M}^2 + \dots \right] = \\
 &= \frac{\uparrow\uparrow}{1 - \textcircled{M}} = \frac{\uparrow\uparrow}{1 - \textcircled{M} \times \uparrow} = \frac{1}{\uparrow\uparrow - \textcircled{M}} \quad (3.35)
 \end{aligned}$$

или после перевода

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{1}{(G_0^+)^{-1} - V_{M_{kk}}}. \quad (3.36)$$

Это и есть результат (3.34). (Заметьте: маленькие кусочки линий, подсоединенные к блоку \textcircled{M} , сами по себе не имеют смысла. Они только показывают, куда нужно приладить линии гриновских функций!)

Наконец, подставляем выражения для G_0^+ и V_M и получаем

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\delta - V_{M_{kk}}} = \frac{1}{\omega - (\varepsilon_k + Mk^2) + i\delta}. \quad (3.37)$$

Сравнивая это с функцией Грина квазичастицы (3.16), находим, что

$$\begin{aligned}
 \varepsilon'_k &= \varepsilon_k + Mk^2 = \left(\frac{1}{2m} + M \right) k^2, \\
 \tau_k &= \frac{1}{\delta} = \infty.
 \end{aligned} \quad (3.38)$$

Иначе говоря, взаимодействие с V_M „одело“ частицу, превратив ее из „голой“ частицы в „квазичастицу“ с измененным законом дисперсии ε'_k [см. (3.38)] и бесконечным вре-

менем жизни. Сравнение с формулой (3.21) показывает, что это в точности тот же результат, который получается и при непосредственном решении уравнения Шредингера!

Теперь, немного успокоившись, мы обнаруживаем, что на результат, который непосредственно получается в три строчки, мы потратили три страницы! Кажется, что это не дает особых оснований для восторга. Не стреляли ли мы из пушки по воробьям? Разумеется, нет! Мы рассматриваем игру в квантовый детский бильярд только как прозрачный пример, позволяющий разъяснить общие принципы. Большая игра с многими частицами нам еще предстоит!

На самом деле в этом простом случае можно поступить значительно лучше, а не просто произвести частичное суммирование (3.33). Действительно, мы можем просуммировать все диаграммы (3.32)

$$\begin{aligned}
 \left\| \right\| &= \left\| \times \left[1 + \left\| \times \textcircled{M} + \left\| \times \textcircled{L} + \left\| \times \textcircled{M}^2 + 2 \times \left\| \times \textcircled{M} \times \textcircled{L} + \dots \right] = \right. \\
 &= \left\| \times \left[1 + \left\| \times (\textcircled{M} + \textcircled{L}) + \left\| \times (\textcircled{M} + \textcircled{L})^2 + \dots \right] = \right. \\
 &= \frac{\left\|}{1 - \left\| \times (\textcircled{M} + \textcircled{L})} = \frac{1}{\left\|^{-1} - (\textcircled{M} + \textcircled{L})} \quad (3.39)
 \end{aligned}$$

или после перевода

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(G_0^+)^{-1} - (V_{Mkk} + V_{Lkk})} = \frac{1}{\omega - \left(\frac{k^2}{2m} + Mk^2 + Lk^4 \right) + i\delta}, \quad (3.40)$$

откуда следует, что

$$\epsilon_k'' = \frac{k^2}{2m} + Mk^2 + Lk^4, \quad (3.41)$$

как и должно быть в соответствии с (3.24). Это показывает, что мы могли бы с таким же успехом с самого начала рассматривать выражение $V = V_M + V_L$ единым образом и пред-

ставлять его одной диаграммой \textcircled{V} . Разбиение же потен-

диала на две части было сделано просто для того, чтобы стала более очевидной параллель с классическим детским бильярдом.

§ 3. Исчезновение неприятных расходимостей

Важно отметить одну слабость описанного метода. Геометрическая прогрессия (3.34) сходится только при $|G_0^+ V_{Mkk}| < 1$; это неравенство означает, что

$$\left| \frac{Mk^2}{\omega - \varepsilon_k + i\delta} \right| < 1, \quad \text{или} \quad \begin{cases} \omega > \varepsilon_k + Mk^2, \\ \omega < \varepsilon_k - Mk^2. \end{cases} \quad (3.42)$$

Но чтобы получить соотношения (3.38), необходимо положить $\omega = \varepsilon_k + Mk^2$, т. е. приравнять как раз тому значению, при котором ряд начинает расходиться! Это типичный пример такого рода расходимостей, которые досаждают диаграммному методу. Обычное домашнее средство против них — принять без доказательства, что выражение для функций Грина справедливо и при значениях ω , лежащих в области расходимости. Это можно назвать „гипотезой исчезновения неприятных расходимостей“.

Во многих случаях удается оправдать эту гипотезу с помощью другого способа вычисления функций Грина. В настоящем случае это как раз можно сделать. Надо лишь в качестве невозмущенного гамильтониана в (3.4) взять выражение

$$H'_0 = \frac{p^2}{2m} + Mp^2, \quad (3.43)$$

а не просто $p^2/2m$, как в (3.5). Свободная функция Грина для этого нового гамильтониана находится с помощью тех же соображений, которые привели нас к формуле (3.13); таким образом,

$$G_0^{+'}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \left(\frac{k^2}{2m} + Mk^2 \right) + i\delta}. \quad (3.44)$$

Это есть в точности результат (3.37), что и оправдывает применение последнего соотношения для всех ω .

Есть и другое указание на то, что расходимости упомянутого типа являются в значительной мере ложными [37]. Именно если производить частичное суммирование не в ω , а в t -пространстве, то расходимость не возникает (по крайней мере в этом простом случае). Так, например, используя

выражение (3.30) и табл. 3 и суммируя только члены, содержащие взаимодействие V_M , мы получаем

$$\begin{aligned}
 G^+(\mathbf{k}, t_2 - t_1) &= -ie^{-ie_k(t_2 - t_1)} \left[1 + (-iV_{Mkk}) \int_{t_1}^{t_2} dt_M + \right. \\
 &\quad \left. + (-iV_{Mkk})^2 \int_{t_1}^{t_2} dt'_M \int_{t_1}^{t'_M} dt_M + \dots \right] = \\
 &= -ie^{-ie_k(t_2 - t_1)} \left[1 + (-iV_{Mkk})(t_2 - t_1) + \frac{1}{2!} (-iV_{Mkk})^2 (t_2 - t_1)^2 + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{3!} (-iV_{Mkk})^3 (t_2 - t_1)^3 + \dots \right] = \\
 &= -ie^{-ie_k(t_2 - t_1)} \left[e^{-iV_{Mkk}(t_2 - t_1)} \right]. \tag{3.45}
 \end{aligned}$$

Это есть как раз фурье-трансформанта функции (3.37); она остается конечной при всех значениях величины $-iV_{Mkk}(t_2 - t_1)$.

Наконец, следует упомянуть, что, хотя рассмотренная здесь задача и тривиальна, Эдвардс показал (см. [3]), что такого же типа диаграммную технику можно применить и к нетривиальным одночастичным системам. Так, с ее помощью можно вычислить уровни энергии и времена жизни электрона в жидком металле (в предположении об отсутствии взаимодействия с другими электронами).

§ 4. Откуда на самом деле берется диаграммное разложение функции Грина?

Результаты этой главы были получены по аналогии со случаем классического детского бильярда. Поскольку такие интуитивные аргументы могут показаться некоторым читателям чем-то вроде заклинаний, мы теперь грубо покажем, каким образом в этом одночастичном случае можно получить диаграммное разложение функции G^+ из уравнения Шредингера. (Вывод для системы многих тел дается в приложениях.)

Первое, в чем необходимо убедиться, — это что величины G_0^+ и G^+ суть на самом деле функции Грина. Напомним, что если мы имеем дифференциальное уравнение вида

$$L\psi(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t), \tag{3.46}$$

где L — линейный дифференциальный оператор, не зависящий явно от x и t , то соответствующая функция Грина G удовлетворяет уравнению

$$LG(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (3.47)$$

Далее невозмущенное уравнение Шредингера можно записать следующим образом:

$$\left(\frac{1}{2m} \nabla^2 + i \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (3.48)$$

Это есть уравнение вида (3.46) [с $f(x, t) = 0$]; следовательно, функция Грина должна удовлетворять уравнению

$$\left(+ \frac{1}{2m} \nabla^2 + i \frac{\partial}{\partial t} \right) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (3.49)$$

Произведем преобразование Фурье

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} G(\mathbf{k}, t - t'). \quad (3.50)$$

Подставляя это в уравнение (3.49), получаем

$$\left(- \frac{k^2}{2m} + i \frac{\partial}{\partial t} \right) G(\mathbf{k}, t - t') = \delta(t - t'). \quad (3.51)$$

Полагая теперь, что G — свободная функция Грина [см. (3.10)]

$$G = G_0^+(\mathbf{k}, t - t') = -i\theta_{t-t'} e^{-ie\mathbf{k}(t-t')}, \quad (3.52)$$

и воспользовавшись равенствами

$$\frac{d\theta_x}{dx} = \delta(x), \quad f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x), \quad (3.53)$$

мы обнаружим, что уравнение (3.51) удовлетворяется. Это и показывает, что G_0^+ есть действительно функция Грина.

Подобным же образом уравнению Шредингера с возмущающим потенциалом вида $V(\mathbf{V})$ [как в (3.19)]

$$\left[\frac{1}{2m} \nabla^2 + i \frac{\partial}{\partial t} - V(\mathbf{V}) \right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (3.54)$$

соответствует уравнение для функции Грина (в \mathbf{k} -пространстве)

$$\left[- \frac{k^2}{2m} + i \frac{\partial}{\partial t} - V(\mathbf{k}) \right] G^+(\mathbf{k}, t - t') = \delta(t - t'). \quad (3.55)$$

Решение его можно записать в виде интегрального уравнения

$$G^+(\mathbf{k}, t - t') = G_0^+(\mathbf{k}, t - t') + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' G_0^+(\mathbf{k}, t - t'') V(\mathbf{k}) G^+(\mathbf{k}, t'' - t'). \quad (3.56)$$

В этом легко убедиться, подставляя соотношение (3.56) в уравнение (3.55) и используя равенство (3.51) при $G = G_0^+$. Наконец, итерируя (3.56), мы получаем для G^+ разложение в ряд теории возмущений

$$\begin{aligned}
 G^+(\mathbf{k}, t - t') = & \\
 = G_0^+(\mathbf{k}, t - t') + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' G_0^+(\mathbf{k}, t - t'') V(\mathbf{k}) G_0^+(\mathbf{k}, t'' - t') + & \\
 + \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' dt''' G_0^+ V G_0^+ V G_0^+ + \dots & \quad (3.57)
 \end{aligned}$$

Оно в точности совпадает с рядом (3.30). Перевод на язык диаграмм выполняется немедленно с помощью словаря табл. 4.

Заметим, что функция Грина для системы многих тел подчиняется уравнению типа (3.47), но при этом оператор L нелинеен.

Литература для дальнейшего чтения:

ФЕЙНМАН, ХИБС [19],
БЬЕРКЕН, ДРЕЛЛ [5],
ФЕЙНМАН [18].

Упражнения ●

1. Одномерная система, первоначально пустая (как и система в § 2 настоящей главы), помещается во внешнее поле типа гармонического осциллятора с характеристической частотой ω_0 [см. (1.34)]. Выпишите одночастичную функцию Грина системы и ее фурье-трансформанту, предполагая, что одночастичные состояния описываются собственными функциями гармонического осциллятора.

2. К системе (из упражнения 1) прикладывается гипотетический внешний возмущающий потенциал вида

$$V \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \right)^3.$$

Рассчитайте вызванную этим возмущением амплитуду вероятности перехода из состояния ϕ_k в состояние ϕ_l , где ϕ_k и ϕ_l — собственные функции гармонического осциллятора.

3. Выпишите диаграммный ряд для функции Грина системы из упражнения 1 с возмущением из упражнения 2 и вычислите функцию Грина, суммируя все члены вплоть до бесконечного порядка (предположите, что существует только одна частица).

4. Каковы закон дисперсии и время жизни квазичастицы в системе из упражнения 3?

5. Вычислите фурье-трансформанты членов первого порядка в разложении (3.30) и покажите, что соответствующие члены имеются и в ряду (3.31).


6. С помощью соотношений (3.53) убедитесь, что функция G_0^+ удовлетворяет уравнению (3.51) для функции Грина,

КВАЗИЧАСТИЦЫ В ФЕРМИ-СИСТЕМАХ

§ 1. Метод функций Грина в системах многих тел

Итак, мы определили квантовую функцию Грина при $t_2 > t_1$, показали, как она выглядит для свободных частиц и квазичастиц, и вычислили ее с помощью частичного суммирования в задаче о квантовом детском бильярде (одна частица при наличии возмущения, сохраняющего импульс). В настоящей главе описанная техника будет обобщена на случай системы многих тел.

Рассмотрим для начала систему N невзаимодействующих фермионов во внешнем поле. В сущности это лжемногочастичная система, ибо, как указывалось в гл. 1, в отсутствие взаимодействия между частицами мы имеем фактически задачу одного тела. Тем не менее такая „тривиальная“ система прокладывает путь к воистину многочастичному случаю. Во-первых, на ее примере мы увидим, как можно очень просто описывать ферми-системы с помощью небольшого числа частиц над уровнем Ферми и небольшого числа удаленных частиц или дырок под уровнем Ферми. Во-вторых, мы познакомимся с языком проблемы многих тел, т. е. с *формализмом чисел заполнения* или *вторичным квантованием*. На самом деле мы не начнем говорить на этом языке вплоть до второй половины книги, но простой пример поможет нам уже теперь выучить несколько наиболее легких слов. Наконец, этот пример покажет нам, как можно обобщить определение функции Грина на случай $t_2 < t_1$. В этом интервале времени возникает кажущийся парадокс: частица наблюдается в системе до того, как она туда попала! Оказывается, что в этом случае функция Грина описывает распространение удаленных частиц или „дырок“; последние изображаются на диаграммах стрелками (\downarrow), обращенными вниз.

В качестве иллюстрации реальной системы многих тел мы рассмотрим ферми-системы с парным взаимодействием (без внешнего потенциала). Речь может идти, например, об N электронах или ядрах в макроскопическом ящике. Вводя специальную диаграмму  для двухчастичного взаимодействия, можно и в этом случае представить функцию Грина в виде бесконечного ряда диаграмм и приближенно вычислить его с помощью частичного суммирования. Некоторые из таких частичных сумм перечислены в табл. 5.

Некоторые важнейшие аппроксимации, которым соответствуют частичные суммы

Таблица 5 ◀

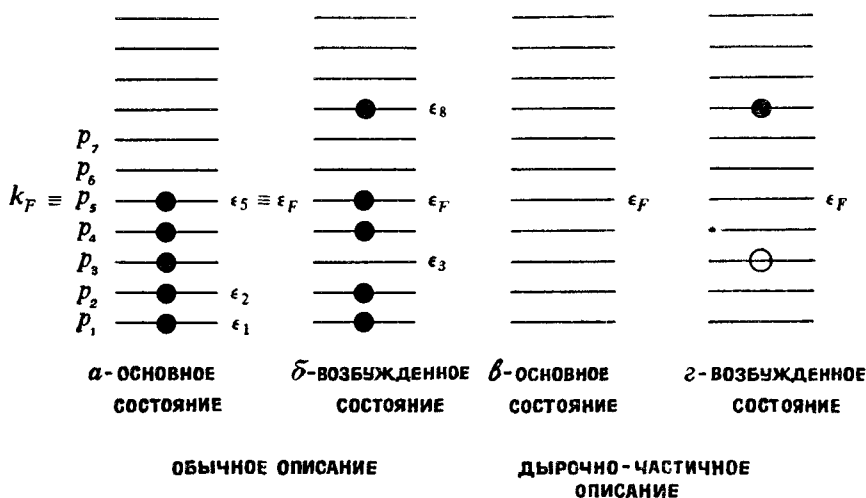
Типы суммируемых диаграмм	Название аппроксимации
«Пузыри»	Приближение Хартри
«Пузыри» и открытые «устрицы»	Приближение Хартри — Фока
«Кольца»	Приближение случайных фаз (RPA)
«Лестницы»	Лестничная аппроксимация

Приближения Хартри и Хартри — Фока самые грубые; они приводят к квазичастицам с бесконечным временем жизни. Приближение случайных фаз (RPA) дает энергии и времена жизни квазичастиц в электронном газе высокой плотности, в то время как лестничная аппроксимация хороша для систем малой плотности, например для ядерной материи. В этой главе будут подробно обсуждаться только приближения Хартри и Хартри — Фока; две другие аппроксимации рассматриваются в гл. 10.

§ 2. Система невзаимодействующих ферми-частиц во внешнем поле: частицы и дырки

Рассмотрим сначала способ описания ферми-систем с помощью частиц и дырок. Пусть мы имеем одну частицу в поле $U(\mathbf{r})$; энергии ее определяются из уравнения (3.4), а соответствующие собственные функции суть $\phi_k(\mathbf{r}) (\equiv \phi_{p_1}, \phi_{p_2}, \dots)$ [см. замечание по поводу обозначений после формулы (3.5)!]. Уровни энергии могут быть представлены, как на фиг. 6, где для простоты система считается невырожденной.

Энергия одной частицы в основном состоянии есть ϵ_{p_1} . Если мы поместим теперь в систему еще $N - 1$ частиц (не взаимодействующих друг с другом), как, например, при заполнении электронами атомных энергетических уровней, то обнаружим, что в соответствии с принципом Паули в каждом состоянии не может быть больше одной частицы. Вся



Фиг. 6. Ферми-система без взаимодействия.

система обладает наименьшей энергией, когда состояния заполняются одно за другим, начиная от дна (как показано на фиг. 6, a для случая $N = 5$). Наивысший заполненный одночастичный уровень называется *уровнем Ферми*; ему отвечает энергия ϵ_F .

В случае, когда $U(\mathbf{r}) = 0$, частицы свободны, и индекс k обозначает импульс, или, точнее, волновое число. Тогда в основном состоянии свободные частицы заполняют в \mathbf{k} -пространстве сферу радиусом $k_F = \sqrt{2m\epsilon_F}$; величина k_F называется *фермиевским импульсом*, заполненная область — *сферой Ферми*, а ее поверхность — *поверхностью Ферми*. При $U(\mathbf{r}) \neq 0$ k представляет собой совокупность трех индексов (для простоты мы пренебрегаем спином), которые, вообще говоря, уже нельзя интерпретировать как компоненты импульса. В этом случае поверхность Ферми уже несферична, и число k_F становится вектором \mathbf{k}_F (читателю, незнакомому с этими положениями, можно порекомендовать книгу [55]¹⁾).

¹⁾ См. также [72]. — Прим ред.

Различные возбужденные состояния системы образуются, если удалить частицу из какого-либо состояния под уровнем Ферми и поместить ее в состояние над уровнем Ферми, как показано на фиг. 6, б. При этом, чтобы избежать трудностей и не рисовать всех частиц, которые оставались на своих местах при возникновении возбужденного состояния, удобнее изображать только перенесенные частицы и оставшиеся после них пустые состояния. Об этих пустых состояниях говорят как о *дырках*: например, на фиг. 6, б символ p_3 отвечает состоянию дырки. Тогда основное состояние будет изображаться, как на фиг. 6, в, а возбужденное, состоящее из одной частицы и одной дырки, — как показано на фиг. 6, г. Такое описание называется *дырочно-частичным*. Заметим, что „частицы“ в новом смысле существуют только над поверхностью Ферми. В тех случаях, когда могут возникнуть недоразумения, мы будем отличать частицу — компоненту пары „частица — дырка“ от обычной частицы, выделяя слово „частица“ курсивом в разрядку. Например,

- частица* — компонента пары „частица — дырка“. Существует только над поверхностью Ферми. (4.1)
- частица — обычная частица. Существует как над, так и под поверхностью Ферми.

Так как дырка в состоянии ϕ_k представляет собой фактически результат удаления частицы из системы, она отвечает также и удалению энергии ϵ_k . Поэтому энергия дырки отрицательна, и мы имеем

$$\epsilon_k^{\text{дыр}} = -\epsilon_k. \quad (4.2)$$

Пространственная зависимость волновой функции дырки будет, очевидно, в точности такой же, как и у удаленной частицы. Следовательно, зависящая от времени волновая функция дырки в состоянии ϕ_k есть

$$\psi(t)^{\text{дыр}} = \phi_k e^{-i(-\epsilon_k t)}, \quad \epsilon_k < \epsilon_F \quad (4.3)$$

(строгое доказательство см. в работе [27]). Свяжем теперь изменение знака перед $\epsilon_k t$ с множителем t , а не с ϵ_k . Тогда мы сможем рассматривать дырку как частицу, движущуюся во времени в обратную сторону. К этому выводу не следует относиться как к теоретическому обоснованию возможности построить машину времени. Речь идет просто о способе описания. Его впервые применил Фейнман в своей теории позитронов¹⁾.

¹⁾ До Фейнмана эта идея была высказана Г. А. Зисманом [73]. — Прим ред.

§ 3. Букварь формализма чисел заполнения (вторичного квантования)

(При первом чтении этот параграф можно пропустить!)

Хотя формализм чисел заполнения, или, как его часто называют, „вторичное квантование“ понадобится нам сколько-нибудь существенно только после гл. 7, для лучшей ориентации неплохо было бы посвятить ему несколько страниц уже сейчас. Этот формализм представляет собой нечто вроде системы обозначений „для производства переписи“. Эта система исключительно удобна, если мы хотим проследить за тем, что происходит в системе многих частиц. Подробности будут изложены в гл. 7.

Полные волновые функции основного и возбужденного состояний системы невзаимодействующих частиц, как уже упоминалось в гл. 1 [см. выражение (1.66)], представляют собой произведения одночастичных волновых функций. Однако, поскольку мы имеем дело с тождественными фермионами, это произведение должно быть антисимметризовано, и правильная волновая функция есть детерминант Фока — Слэтера

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_{k_1}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_{k_N}(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_{k_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (4.4)$$

Здесь через ϕ_k обозначены одночастичные функции (3.4). Если частицам позволено взаимодействовать друг с другом или с внешним возмущающим потенциалом, то точные волновые функции системы уже не имеют вида (4.4), а представляют собой линейные комбинации функций Φ

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{k_1, \dots, k_N} A_{k_1, \dots, k_N} \Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (4.5)$$

Таким образом, волновые функции $\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}$ системы без взаимодействия используются в качестве базисных при описании системы с взаимодействием.

Эти выражения довольно неуклюжи, и было бы желательно найти более компактный способ записи их. Заметим, что в силу неразличимости частиц главная информация, которая содержится в выражении (4.4), состоит в том, сколько частиц находится в каждом из одночастичных состояний. Поэтому мы так же хорошо можем определить состояние системы без взаимодействия, записав Φ в виде

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \Phi_{n_{p_1}, n_{p_2}, \dots, n_{p_l}, \dots}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$$

или (для краткости)

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = |n_{p_1}, n_{p_2}, \dots, n_{p_l}, \dots\rangle; \quad (4.6)$$

это означает, что в состоянии ϕ_{p_1} находится n_{p_1} частиц, в состоянии ϕ_{p_2} находится n_{p_2} частиц и т. д., причем $n_k = 0$ или 1 в соответствии с принципом Паули. Эта система обозначений использует так называемые *числа заполнения*. Она аналогична той, что принята для спецификации распределения электронов в атомах по оболочкам; например, символ $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^1$ обозначает, что имеются два электрона в состоянии $1s$

(один — со спином вверх, другой — со спином вниз), два электрона в состоянии $2s$ и т. д. Мы уже встречались с такими обозначениями, говоря о фононах; см. (1.42). [Заметим, однако, что в формуле (1.42) величина n_q могла быть равна любому целому числу, а не только 0 или 1. Это связано с тем, что фононы подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна.]

С помощью чисел заполнения волновую функцию основного состояния на фиг. 6, а можно записать в виде

$$\Phi_{k_1=p_1, k_2=p_2, k_3=p_3, k_4=p_4, k_5=p_5} = |1_{p_1}, 1_{p_2}, 1_{p_3}, 1_{p_4}, 1_{p_5}, 0_{p_6}, 0_{p_7}, 0_{p_8}, \dots, 0, 0, \dots\rangle, \quad (4.7)$$

а возбужденное состояние на фиг. 6, б описывается функцией

$$\Phi_{k_1=p_1, k_2=p_2, k_3=p_4, k_4=p_5, k_5=p_8} = |1_{p_1}, 1_{p_2}, 0_{p_3}, 1_{p_4}, 1_{p_5}, 0_{p_6}, 0_{p_7}, 1_{p_8}, 0_{p_9}, \dots\rangle. \quad (4.8)$$

В дальнейшем для краткости мы будем в индексах опускать букву p , оставляя только цифры. Тогда

$$\Phi = |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (4.9)$$

Например, функция (4.7) запишется в виде

$$\Phi_0 = |1_1, 1_2, 1_3, 1_4, 1_5, 0_6, 0_7, 0_8, \dots\rangle.$$

Важно отметить, что, подобно исходным детерминантам Фока — Слэтера, волновые функции, выраженные через числа заполнения, образуют полную ортогональную систему. Поэтому

$$\begin{aligned} \langle n'_1, \dots, n'_i, \dots | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle &= \\ &= \int d^3r_1 \dots d^3r_N \Phi_{n'_1, \dots, n'_i, \dots}^* (r_1, \dots, r_N) \times \\ &\times \Phi_{n_1, \dots, n_i, \dots} (r_1, \dots, r_N) = \delta_{n'_1 n_1} \dots \delta_{n'_i n_i} \dots \end{aligned} \quad (4.10)$$

Как и в случае (4.5), функции $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ можно использовать в качестве базисных для описания волновых функций системы с взаимодействием

$$\Psi = \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} A_{n_1, \dots, n_i, \dots} |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (4.11)$$

Далее, в большинстве интересующих нас задач лишь немногие из частиц меняют свои положения по сравнению с основным состоянием: мы имеем дело главным образом со слабо возбужденными состояниями. Следовательно, выписывать все неизменившиеся единицы в волновой функции, как, например, в формуле (4.8), почти так же полезно, как брать с собой в двухдневное путешествие всю имеющуюся одежду. Можно избежать лишнего багажа, если рассматривать основное состояние (4.7) как „нуль“ или так называемый *ферми-вакуум* нашей системы и указывать в аргументах функции $|\dots\rangle$ только *изменения* по сравнению с основным состоянием. Тогда основное состояние (ферми-вакуум) будет записываться так, как если бы оно вовсе не содержало частиц;

$$\Phi_0 = |0\rangle; \quad (4.12)$$

см. фиг. 6, в. С этой точки зрения возбужденное состояние на фиг. 6, б содержит *частицу* [см. (4.1)!] и дырку соответственно над и под уров-

нем ε_F (фиг. 6, z), а волновая функция этого состояния есть

$$\Phi = |1_3^h, 1_8^p\rangle. \quad (4.13)$$

Здесь индексы h и p означают дырку и *частицу*, а сама система обозначений называется „дырочно-частичной“.

В формализме чисел заполнения квантовомеханические операторы имеют новый вид. Представим себе исходную одночастичную систему в низшем энергетическом состоянии, описываемом функцией $\phi_1(\mathbf{r}) (\equiv \phi_{p_1}(\mathbf{r}))$. С помощью чисел заполнения эту функцию можно записать в виде

$$\Phi_{\text{исх}} = \phi_1(\mathbf{r}) = |1000 \dots\rangle. \quad (4.14)$$

Пусть теперь система подвергается действию некоторого возмущения, оператор энергии которого есть $V(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Оно может вызвать переход, скажем, в состояние ϕ_3 , так что

$$\Phi_{\text{кон}} = \phi_3(\mathbf{r}) = |001000 \dots\rangle. \quad (4.15)$$

Таким образом, будучи записано в этом формализме, действие оператора V проявляется в *уничтожении* частицы в состоянии ϕ_1 и *создании* частицы в состоянии ϕ_3 . Это наводит на мысль, что если мы определим два основных оператора: c_i (краткая запись c_{p_i}), который уничтожает частицу в $\phi_i (\equiv \phi_{p_i})$, и c_i^\dagger , который рождает частицу в ϕ_i , то мы сможем записать все операторы в виде различных комбинаций этих двух основных. [Заметим, что эти операторы похожи на фоновые операторы b_q и b_q^\dagger ; см. (1.36) и дальше.] Так оно и есть на самом деле.

Посмотрим сначала подробнее, как действуют операторы c :

$$\begin{aligned} c_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= n_i |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle, \\ c_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= (1 - n_i) |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Множитель n_i означает, что оператор c_i не может уничтожить частицу в состоянии ϕ_i , если там вообще нет частиц и действовать не на что; множитель $(1 - n_i)$ означает, что оператор c_i^\dagger не может создать еще одной частицы в уже занятом состоянии (для простоты мы опустили множители ± 1 ; см. гл. 7). Например,

$$\begin{aligned} c_3 |11111000 \dots\rangle &= |1101100 \dots\rangle, \\ c_2 |0000 \dots\rangle &= 0, \\ c_n |00 \dots 1_j \dots\rangle &= \delta_{nj} |00 \dots\rangle, \\ c_3^\dagger |11111000 \dots\rangle &= 0, \\ c_2^\dagger |00 \dots\rangle &= |0100 \dots\rangle, \\ c_m^\dagger |00 \dots 0_m \dots\rangle &= |00 \dots 1_m \dots\rangle \end{aligned} \quad (4.17)$$

При частично-дырочном описании необходимо ввести операторы рождения и уничтожения для дырок: b_i^\dagger , b_i [не пугать с фоновыми операторами (1.36)!] и аналогично для *частиц*: a_i^\dagger , a_i . При этом если $k_i < k_F$,

то оператор c_i уничтожает частицу под уровнем Ферми, создавая таким образом дырку. Следовательно,

$$\begin{aligned} \text{при } k_i > k_F \quad c_i &= a_i - \text{оператор уничтожения частицы} \\ k_i < k_F \quad c_i &= b_i^\dagger - \text{оператор рождения дырки;} \\ \text{при } k_i > k_F \quad c_i^\dagger &= a_i^\dagger - \text{оператор рождения частицы,} \\ k_i < k_F \quad c_i^\dagger &= b_i - \text{оператор уничтожения дырки.} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Такой переход к операторам *частицы-дырки* можно выразить компактно в виде преобразования

$$\begin{aligned} c_i &= \theta_{k_i - k_F} a_i + \theta_{k_F - k_i} b_i^\dagger, \\ c_i^\dagger &= \theta_{k_i - k_F} a_i^\dagger + \theta_{k_F - k_i} b_i, \end{aligned} \quad (4.19)$$

где

$$\theta_x = \begin{cases} 1 & \text{для } x > 0, \\ 0 & \text{для } x < 0. \end{cases}$$

Вот простые примеры того, как работают эти операторы:

$$\begin{aligned} a_i^\dagger |0\rangle &= |1_i^p\rangle, & a_i |1_i^p\rangle &= \delta_{ii} |0\rangle, & b_j^\dagger a_i^\dagger |1_m^p\rangle &= |1_m^p, 1_i^p, 1_j^h\rangle, \\ b_j^\dagger |0\rangle &= |1_j^h\rangle, & b_j |1_m^h\rangle &= \delta_{jm} |0\rangle, & a_i |0\rangle &= b_i |0\rangle = 0, \\ a_i^\dagger |1_i^p\rangle &= 0, & b_j^\dagger |1_j^h\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Чтобы выразить другие операторы через c (или a и b), надо лишь потребовать следующее: пусть $\mathcal{O}^{\text{стар}}$ есть оператор в прежних обозначениях, а $\mathcal{O}^{\text{ч.з}}$ — тот же оператор в формализме чисел заполнения (или частиц-дырок), тогда матричные элементы оператора $\mathcal{O}^{\text{ч.з}}$, вычисленные с помощью волновых функций в формализме чисел заполнения (или частиц-дырок), должны быть такими же, как и у оператора $\mathcal{O}^{\text{стар}}$, „обложенного“ детерминантами Фока — Слэтера. Рассмотрим сначала одночастичный случай, когда детерминант сводится просто к функции ϕ_i . Тогда мы должны иметь

$$\begin{aligned} \langle 00 \dots 1_i \dots | \mathcal{O}^{\text{ч.з}} | \dots 1_j \dots \rangle &= \langle \phi_i | \mathcal{O}^{\text{стар}} | \phi_j \rangle \\ &= \left(\int \phi_i^*(\mathbf{r}) \mathcal{O}(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \equiv \mathcal{O}_{ij} \right). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Немного созерцания в буддистском стиле, и мы увидим, что поставленному условию удовлетворяет выражение

$$\mathcal{O}^{\text{ч.з}} = \sum_{mn} \mathcal{O}_{mn} c_m^\dagger c_n \quad (4.22)$$

Действительно, используя соотношения (4.17) и (4.10), мы получаем

$$\begin{aligned} \langle \dots 1_i \dots | \mathcal{O}^{\text{ч.з}} | \dots 1_j \dots \rangle &= \sum_{mn} \mathcal{O}_{mn} \langle \dots 1_i \dots | c_m^\dagger c_n | \dots 1_j \dots \rangle = \\ &= \sum_{mn} \mathcal{O}_{mn} \delta_{im} \delta_{nj} = \mathcal{O}_{ij}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Пользуясь формулами (4.18), можно представить выражение (4.22) также в частично-дырочном формализме. Оказывается, что полученный результат справедлив и для систем с произвольным числом частиц.

Гамильтониан любой системы можно выразить в формализме чисел заполнения или частиц-дырок. Пусть, например, гамильтониан, записанный с помощью старой неандертальской системы обозначений, отвечает системе с внешним возмущающим потенциалом

$$H_{\text{неандер}} = \underbrace{\sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(r_i) \right]}_{H_0} + \underbrace{\sum_i V(r_i)}_{H_1 \text{ (возмущение)}} \quad (4.24)$$

и одночастичные функции ϕ_k удовлетворяют уравнению

$$\left[\frac{p^2}{2m} + U(r) \right] \phi_k = \epsilon_k \phi_k. \quad (4.25)$$

Тогда как показано в гл. 7,

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k = \sum_{k > k_F} \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k < k_F} \epsilon_k b_k b_k^\dagger, \\ H_1 &= \sum_{\substack{m, n > k_F \\ n < k_F}} V_{mn} a_m^\dagger a_n + \sum_{\substack{m > k_F \\ n < k_F}} V_{mn} a_m^\dagger b_n^\dagger + \sum_{\substack{m < k_F \\ n > k_F}} V_{mn} b_m a_n + \\ &\quad + \sum_{m, n < k_F} V_{mn} b_m b_n^\dagger. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Для системы взаимодействующих частиц со старым гамильтонианом

$$H_{\text{стар}} = \underbrace{\sum_i \frac{p_i^2}{2m}}_{H_0} + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i, j} V(r_i - r_j)}_{H_1 \text{ (возмущение)}} \quad (4.27)$$

мы получаем

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{k > k_F} \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k < k_F} \epsilon_k b_k b_k^\dagger, \quad \epsilon_k = \frac{k^2}{2m}, \\ H_1 &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, l, m, n > k_F \\ n < k_F}} V_{klmn} a_l^\dagger a_k^\dagger a_m a_n + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, l, m > k_F \\ n < k_F}} V_{klmn} a_l^\dagger a_k^\dagger a_m b_n^\dagger + \dots \\ &\quad \dots + \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n < k_F} V_{klmn} b_l b_k b_m^\dagger b_n^\dagger. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Величины V_{klmn} определены равенством (4.42)

Следует помнить что в случае системы с взаимодействием волновые функции представляют собой линейные комбинации (4.11).

§ 4. Функция Грина для системы невзаимодействующих ферми-частиц во внешнем возмущающем поле

До сих пор мы работали с функцией Грина, определенной только для положительной разности времен, т. е. для $t_2 > t_1$. Этого было достаточно для решения сверхпростой задачи о квантовом детском бильярде, но не в более сложных случаях. Для общей трактовки надо обобщить наше определение на времена $t_2 < t_1$. Конечно, это звучит странно, ибо кажется, что мы будем описывать частицу, распространяющуюся во времени в обратном направлении. Однако, как уже объяснялось в связи с соотношением (4.3), такая частица из „машины времени“ есть не плод научной фантастики, а просто удаленная частица или „дырка“. Иными словами, частица, движущаяся вспять во времени от момента t_1 к t_2 ($t_2 < t_1$), в точности эквивалентна дырке, движущейся во времени вперед от t_2 к t_1 .

В результате приходим к следующему определению:

$$iG(k_2, k_1, t_2 - t_1)_{t_2 < t_1} \equiv iG^-(k_2, k_1, t_2 - t_1) = (-1) \times \text{Амплитуда вероятности того, что если в основном состоянии системы с взаимодействием в момент } t_2 \text{ удаляется частица из состояния } \phi_{k_2} \text{ (т. е. возникает дырка в состоянии } \phi_{k_2}), \text{ то в момент } t_1 \text{ система будет в основном состоянии, в котором удалена частица из } \phi_{k_1} \text{ (т. е. появилась дырка)}$$
(4.29)

По аналогии с (3.3) G^- определяется при $t_2 > t_1$ (но не при $t_2 = t_1$!) следующим образом:

$$-iG^-(k_2, k_1, t_2 - t_1)_{t_2 > t_1} = 0. \tag{4.30}$$

Таким образом, G^- есть дырочная функция Грина. [Множитель (-1) по сравнению с (3.1) возникает из-за того, что мы имеем дело с фермионами; см. гл. 9. Функцию G^- называют „опережающей“.]

Понятие „дырка“ подразумевает здесь „удаление частицы“, т. е. имеет более общий смысл, чем в § 2 настоящей главы. Там мы рассматривали систему без взаимодействия, поэтому частицы могли удаляться только из области $k < k_F$, и все дырки отвечали значениям $k < k_F$. Однако в основном состоянии системы с взаимодействием в соответствии с формулой (4.11) частица может находиться с конечной вероятностью

и в области над уровнем Ферми. Следовательно, мы можем удалить частицу или создать дырку (в этом более общем смысле) и при $k > k_F$. Пусть „дырочная функция Грина“ G^- определена, как указывалось выше, для $t_2 < t_1$. Тогда свободная функция G_0^- отлична от нуля лишь при $k < k_F$, но в полной функции G^- значения k могут быть любыми.

Для свободной дырки те же соображения, что и в случае (3.8)¹⁾, по отношению к „однодырочному“ состоянию (4.3) дают

$$G_0^-(k, t_2 - t_1) = \begin{cases} i\theta_{t_1 - t_2} e^{-i\varepsilon_k(t_2 - t_1)} & \text{для } t_2 \neq t_1, \quad \varepsilon_k < \varepsilon_F, \\ i & \text{для } t_2 = t_1. \end{cases} \quad (4.31)$$

Фурье-трансформанта этого выражения имеет вид

$$G_0^-(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - i\delta}, \quad \varepsilon_k < \varepsilon_F. \quad (4.32)$$

Предположим теперь, что мы включили внешний возмущающий потенциал $V(\mathbf{r})$ [отличный от $U(\mathbf{r})$ — части невозмущенного гамильтониана] и хотим найти, скажем, одночастичную функцию Грина $G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1)$, или $G^+(k_2, k_1, \omega)$. Она будет равна сумме амплитуд вероятности всех траекторий, по которым частица может двигаться в системе, взаимодействуя нуль или более раз с потенциалом $V(\mathbf{r})$. Ранее мы уже выписали ряд для функции Грина и перевели его на диаграммный язык. Сейчас мы все сделаем шиворот-навыворот, т. е. запишем сначала диаграммы, а потом превратим их в функциональный ряд. Для этой цели нам будет необходим видоизмененный словарь (подобный табл. 4), в котором есть линии, идущие вниз, для дырочных функций Грина (он приведен в табл. 6). Обратите внимание на обратный порядок времени на диаграммах для дырочных функций Грина! Разумеется, это есть следствие того факта, что для дырок $t_2 < t_1$. Причина, по которой этот диаграммный метод называется „методом Голдстоуна“, будет указана в § 5 гл. 9.

Матричный элемент энергии взаимодействия V_{kl} заслуживает того, чтобы о нем немного поговорить. Он дается выражением

$$V_{kl} = \int d^3\mathbf{r} \phi_k^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \phi_l(\mathbf{r}). \quad (4.33)$$

¹⁾ В соответствии со сказанным в примечании на стр. 54 соотношение (3.8) и функция G_0^+ в (3.9) описывают движение *частицы*, так как $\varepsilon_k > \varepsilon_F$.

(k, t)-пространство		(k, ω)-пространство	
Слово	Диаграмма	Слово	Диаграмма
$iG^+(k_2, k_1, t_2 - t_1)$ (частица, см (3.2))		$iG^+(k_2, k_1, \omega)$	
$iG^-(k_2, k_1, t_2 - t_1)$ (дырка, см. (4.29))		$iG^-(k_2, k_1, \omega)$	
$iG_0^+(k, t_2 - t_1) =$ $= \theta_{t_2 - t_1} \exp[-i\varepsilon_k(t_2 - t_1)]$ (=0 для $t_2 = t_1$) (свободная частица)		$iG_0^+(k, \omega) = \frac{i}{\omega - \varepsilon_k + i\delta}$	
$iG_0^-(k, t_2 - t_1) =$ $= -\theta_{t_1 - t_2} \exp[-i\varepsilon_k(t_2 - t_1)]$ (= -1 для $t_2 = t_1$) (свободная дырка)		$iG_0^-(k, \omega) = \frac{i}{\omega - \varepsilon_k - i\delta}$	

	или		или	
4 ВОЗМОЖНОСТИ				
а	б	в	г	д

$-iVkl$		или		$-iVkl$	
4 ВОЗМОЖНОСТИ					
а	б	в	г	д	е

(взаимодействие с внешним возмущением, см. (4.33))

Четыре различные возможности, показанные в табл. 6, таковы: *а* — рассеяние *частицы* [вспомните (4.1)!] из состояния ϕ_l в состояние ϕ_k ; *б* — рассеяние с переходом частицы из состояния ϕ_l , где $\epsilon_l < \epsilon_F$, в состояние ϕ_k с $\epsilon_k > \epsilon_F$ (таким образом, создаются *частица* в состоянии ϕ_k и *дырка* в состоянии ϕ_l); *в* — и т. д.

Отметим, что эти четыре возможности соответствуют в данном случае четырем членам взаимодействия в дырочно-частичном гамильтониане (4.26).

Конечно, после взаимодействия в состоянии k появляется не обязательно та же частица, которая занимала состояние l , — в системе неразличимых частиц это не имеет смысла. Тем не менее ради чисто словесной простоты принято описывать взаимодействия так, как если бы частицы были различимыми; читатель все время должен иметь в виду, что это есть не более, чем просто способ выразаться.

С помощью табл. 6 легко изобразить диаграммный ряд для функции G^+ в виде суммы всех возможных различных диаграмм, которые можно построить из последовательности точек — взаимодействий, соединенных линиями частиц или дырок, причем входящая линия отвечает состоянию k_1 , а выходящая — состоянию k_2 :

$$\begin{array}{cccccccc}
 t_2 & t_2 & t_2 & t_2 & t_2 & & & \\
 k_2 & k_2 & k_2 & k_2 & k_2 & & & \\
 \parallel & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\
 & & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\
 k_1 & k_1 & k_1 & k_1 & k_1 & k_1 & k_1 & k_1 \\
 t_1 & t_1 & t_1 & t_1 & t_1 & & & \\
 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & &
 \end{array}$$

(4.34)

[Заметим, что в соответствии с формулой (3.9) диаграмма 1 исчезает при $k_2 \neq k_1$.] Физический смысл линий, соответствующих дыркам, можно понять, посмотрев на диаграмму 4. *Частица* в состоянии k_1 ($\equiv \phi_k$) появляется в системе в момент времени t_1 . В момент t' потенциал выбивает частицу из состояния l в состояние k_2 , создавая таким образом *частицу* в k_2 и *дырку* в l . В момент t *частица* в состоянии k_1 сталкивается с *дыркой* (в состоянии l), в резуль-

тате чего происходит взаимная аннигиляция, а *частица* в состоянии k_2 продолжает распространяться по системе до момента t_2 .

Следует отметить, что во многих диаграммах рассматриваемого ряда нарушается принцип запрета Паули. Например, при $k_1 = k_2$, на диаграмме 4 присутствуют две частицы в одном и том же состоянии k_1 . Такие диаграммы надо учитывать. Основания к тому обсуждаются в конце приложения VII (см. также § 6 этой главы).

Забавно попробовать навести бухгалтерию на процессы, описываемые диаграммой 4, с помощью дырочно-частичной системы обозначений, считая, что H_1 дается выражением (4.26). Последовательность событий будет такая:

1. Помещаем *частицу* в состояние k_1 в момент t_1 :

$$a_{k_1}^+ |0\rangle = |1_{k_1}^p\rangle.$$

2. В момент t' один из членов в H_1 действует на систему, создавая *частицу* в состоянии k_2 и дырку в l :

$$V_{k_2 l} a_{k_2}^+ b_l^+ |1_{k_1}^p\rangle = V_{k_2 l} |1_{k_1}^p, 1_l^h, 1_{k_2}^p\rangle.$$

[Обратите внимание: при $k_2 = k_1$ мы имеем $a_{k_1}^+ |1_{k_1}^p, 1_l^h\rangle$, что равно нулю в соответствии с (4.20). Тем не менее диаграмма 4 из (4.34), описывающая этот процесс, не дает нулевого вклада! Как только что упоминалось, эта диаграмма — нарушитель принципа Паули, и ее тем не менее следует учитывать (см. § 6 настоящей главы)].

3. В момент t оператор H_1 действует снова, уничтожая дырку в l и *частицу* в k_1 :

$$V_{l k_1} b_l a_{k_1} [V_{k_2 l} |1_{k_1}^p, 1_l^h, 1_{k_2}^p\rangle] = V_{k_2 l} V_{l k_1} |1_{k_2}^p\rangle.$$

4. В момент t_2 убираем *частицу* у:

$$a_{k_2} [V_{k_2 l} V_{l k_1} |1_{k_2}^p\rangle] = V_{k_2 l} V_{l k_1} |0\rangle. \quad (4.35)$$

Изображенный выше диаграммный ряд можно записать и словами, если воспользоваться словарем табл. 6. Опуская множитель i , получаем в (k, t) -пространстве

$$\begin{aligned} G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) &= G_0^+(k_1, t_2 - t_1) \delta_{k_1 k_2} + \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt G_0^+(k_2, t_2 - t) V_{k_2 k_1} G_0^+(k_1, t - t_1) + \\ &+ \sum_{q > k_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \dots + \dots \end{aligned} \quad (4.36)$$

или в (k, ω) -пространстве (для краткости мы опускаем аргумент ω)

$$G^+(k_2, k_1) = \delta_{k_1 k_2} G_0^+(k_1) + G_0^+(k_1) V_{k_2 k_1} G_0^+(k_2) + \\ + \sum_{q > k_F} G_0^+(k_1) V_{q k_1} G_0^+(q) V_{k_2 q} G_0^+(k_2) + \\ + \sum_{l < k_F} G_0^+(k_1) V_{l k_1} G_0^-(l) V_{k_2 l} G_0^+(k_2) + \dots \quad (4.37)$$

Мы не забыли здесь просуммировать по всем возможным промежуточным состояниям q, l и т. д. Действительно, одна диаграмма, например с буквой q , на самом деле представляет бесчисленное множество диаграмм, в каждой из которых фигурируют различные значения q ($q > k_F$ сокращенно обозначает $\varepsilon_q > \varepsilon_F$ и т. д.).

Интервалы интегрирования в формуле (4.36) автоматически ограничиваются θ -функциями, входящими в G^+ и G^- . Так, на диаграмме 3 из (4.34) все линии соответствуют функциям Грина *частиц*, поэтому мы видим, что $t_1 < t < t' < t_2$. На диаграмме 4, поскольку линия l представляет функцию Грина дырки, t должно быть больше t' , и мы находим: если $t_1 < t < t_2$, то $-\infty < t' < t$, в то время как если $t_2 < t < +\infty$, то $-\infty < t' < t_2$ ¹⁾.

Однако, начав вычислять эти интегралы по времени, вы придете в ужас от мелькания осциллирующих на бесконечности экспонент — в точности так же, как и при выводе формулы (3.12). Чтобы избавиться от этого, следует заменить пределы интегрирования $\pm\infty$ на $\pm\infty(1-i\eta)$, где η — положительная, бесконечно малая величина [как и δ в случае (3.13)], такая, что $\eta \times \infty = \infty$. Эта замена обосновывается строгим выводом разложения для функции Грина [см. приложение V, особенно соотношение (V.11)].

Могло бы показаться, что измененные пределы доставят нам хлопоты при выполнении преобразования Фурье от (4.36) к (4.37). Действительно, пределы $\pm\infty$ были необходимы, чтобы получить δ -функции $\delta(\omega - \omega')$, как в формуле (2.23). Оказывается, однако, что вновь возникающие интегралы, которые имеют вид

$$\int_{T_1}^{T_2} dt e^{i\Delta \varepsilon t},$$

где $T_1 = -\infty(1-i\eta)$, а $T_2 = +\infty(1-i\eta)$, также представляют собой законные δ -функции, так что фактически трудностей не возникает.

Рассмотрим теперь простой пример, показывающий, как вычислять функцию G^+ с помощью частичного суммирования.

¹⁾ Строго говоря, в методе Голдстоуна диаграммы „упорядочены по времени“ (см. стр. 182, 183), поэтому для диаграммы 4 из (4.34) $t_1 < t' < t$, $t_1 < t < t_2$. Есть и другие аналогичные диаграммы, но для них $-\infty < t' < t_1$ и (или) $t_2 < t < \infty$. Эти диаграммы можно добавить к диаграмме 4, и в результате мы получим указанный выше интервал интегрирования.

Положим $k_1 = k_2 = k$ ($k > k_F$), и пусть потенциал таков, что матричные элементы V_{km} и V_{mk} (помните: $m < k_F$ сокращенно означает $\varepsilon_m < \varepsilon_F$!) велики, а все остальные — малы. Тогда функцию Грина (4.34) можно аппроксимировать суммой следующих диаграмм:

$$\begin{aligned}
 & \approx \text{single line } k, \omega + \text{loop } m, k + \text{double loop } m, k + \dots \\
 & = \text{single line } k, \omega \times \left[1 + \text{loop } m, k + \text{double loop } m, k + \dots \right] = \frac{1}{\text{diagram with loop } m, k \text{ and vertical line } -1}
 \end{aligned}
 \tag{4.38}$$

или

$$\begin{aligned}
 G^+(k, \omega) &= \frac{1}{[G_0^+(k, \omega)]^{-1} - V_{km} V_{mk} G_0^-(m, \omega)} \\
 &= \frac{1}{(\omega - \varepsilon_k + i\delta) - \frac{|V_{km}|^2}{\omega - \varepsilon_m - i\delta}}.
 \end{aligned}
 \tag{4.39}$$

Этот результат, очевидно, не имеет квазичастичного вида (3.16). Однако в соответствии с правилом (3.14) полюсы G^+ дают энергии возбужденных состояний возмущенной системы. Таким образом, пренебрегая членами с $i\delta$ (в этом простом расчете они не имеют значения), мы получаем

$$\omega - \varepsilon_k - \frac{|V_{km}|^2}{\omega - \varepsilon_m} = 0,
 \tag{4.40}$$

откуда

$$\begin{aligned}
 \omega &= \varepsilon'_k = \frac{\varepsilon_k + \varepsilon_m}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_k - \varepsilon_m)^2 + 4|V_{km}|^2}, \\
 \omega &= \varepsilon'_m = \frac{\varepsilon_k + \varepsilon_m}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_k - \varepsilon_m)^2 + 4|V_{km}|^2}.
 \end{aligned}
 \tag{4.41}$$

В случае слабого взаимодействия, когда $V_{km} \rightarrow 0$, правые части (4.41) превращаются в $\varepsilon_k, \varepsilon_m$. Однако формулы остаются в силе и при сильном взаимодействии, когда матричный элемент V_{km} порядка или больше расстояния между уровнями $\varepsilon_k - \varepsilon_m$.

Эксперты, посмотрев на соотношения (4.41), скажут, что это просто формулы для новых энергий одночастичной двух-

уровневой системы, помещенной в возмущающее поле. Конечно, мы могли бы предсказать этот результат с самого начала, ибо наша система в действительности одночастичная — по предположению частицы не взаимодействуют друг с другом. Опять, о чем уже упоминалось в связи с квантовым детским бильярдом, это обстоятельство нельзя рассматривать как демонстрацию того, что „мощная“ диаграммная техника дает лишь более сложный метод получения тривиальных результатов. Речь идет скорее о сверх-простой иллюстрации общих принципов.

В следующем параграфе мы перейдем к настоящей задаче многих тел.

§ 5. Система взаимодействующих ферми-частиц

Представим себе теперь настоящую систему многих частиц. Пусть она состоит из N фермионов, взаимодействующих посредством двухчастичных сил с потенциалом $V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$, зависящим только от расстояния между частицами $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Для простоты предположим, что внешних полей нет, поэтому одночастичные волновые функции и энергии суть просто $\phi_k = \Omega^{-1/2} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ и $\epsilon_k = k^2/2m$ [см формулы (3.4) и (3.5)]. Наша задача — построить с помощью диаграмм ряд теории возмущений для функции Грина этой системы, вычислить его путем частичного суммирования и испытать результат на „квазичастичность“.

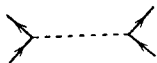
Первое, что нам понадобится, — это амплитуда вероятности процесса, в котором две частицы — одна в состоянии ϕ_m , а вторая в состоянии ϕ_n — сталкиваются друг с другом и рассеиваются, переходя соответственно в состояния ϕ_k и ϕ_l . Аналогично амплитуде взаимодействия V_{kl} (4.33), искомая величина представляет собой просто матричный элемент

$$V_{klmn} = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \phi_m(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}') = V_{lknm}. \quad (4.42)$$

Так же как и в случае (\mathbf{r}, t) -пространства [см. (1.3)], рассматриваемое взаимодействие можно представить на диаграмме в виде волнистой линии

$$\begin{array}{c} \mathbf{k} \\ \swarrow \\ \text{---} \\ \searrow \\ \mathbf{m} \end{array} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \begin{array}{c} \mathbf{l} \\ \swarrow \\ \text{---} \\ \searrow \\ \mathbf{n} \end{array} \equiv (-i) \frac{1}{2} V_{klmn}. \quad (4.43)$$

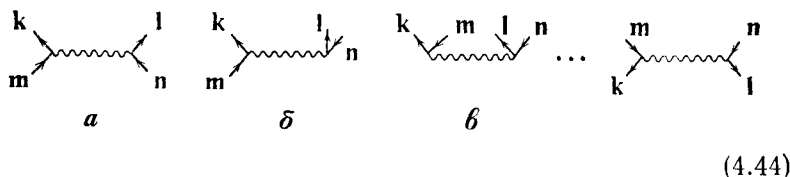
Здесь левая точка пересечения, или „вершина“, отвечает рассеянию одной частицы из m в k , а правая „вершина“ — рассеянию другой частицы из n в l . [Большинство авторов изображают взаимодействие в виде пунктирной линии



мы, однако, всегда будем использовать волнистую линию (4.43).]

Множитель $1/2$ в (4.43) появляется из соотношения (4.28) для H_1 . Позднее он исчезнет в соответствии с правилом (4.60)

Пользуясь дырочно-частичным описанием, можно изобразить матричный элемент (4.43) в более подробном виде



(4.44)

Диаграмма a описывает обычное рассеяние двух частиц из состояний m, n в состояния k, l . На диаграмме $б$ частица в состоянии ϕ_m сталкивается с частицей в состоянии ϕ_n ниже уровня Ферми. В результате частица выбивается из ϕ_n и возникают дырка в ϕ_n и частица над поверхностью Ферми в состоянии ϕ_l . В то же время исходная частица переходит в состояние ϕ_k . И так далее.

Обратите внимание диаграммы (4.44) в точности соответствуют определенным членам взаимодействия в гамильтониане (4.28)

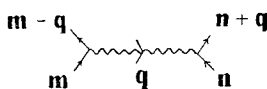
Исключительно важно уяснить себе последовательность индексов в матричном элементе V_{klmn} и их изображение на диаграмме: k — линия, выходящая из левой вершины; l — линия, выходящая из правой вершины, m — линия, входящая в левую вершину; n — линия, входящая в правую вершину. Есть простое мнемоническое правило — нужно только запомнить шаг фокстрота. левая налево, правая направо, левая направо, правая налево!

Взаимодействие $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ сохраняет полный импульс и спин, так как оно зависит только от модуля разности $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ и, следовательно, не может изменить положения

центра инерции двух сталкивающихся частиц или перебросить их спины. Таким образом,

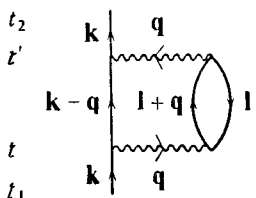
$$\mathbf{k} + \mathbf{l} = \mathbf{m} + \mathbf{n}, \quad \sigma_k + \sigma_l = \sigma_m + \sigma_n. \quad (4.45)$$

Если интерпретировать стрелки на диаграммах (4.44) как указатели направления „течения импульса“, то соотношения (4.45) показывают, что импульс, „втекающий в точку взаимодействия“, равен импульсу, „вытекающему“ из нее. Удобно включить это в систему обозначений, полагая



$$\begin{aligned} &\equiv -i \times \frac{1}{2} V_{m-\sigma, n+q, m, n} \\ &= -i \times \frac{1}{2} V_q. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Запись матричного элемента в виде V_q обосновывается соотношением (7.70). Все это предполагает, что, какой бы сложной ни была цепь процессов столкновения, импульс в начале цепи равен импульсу в конце. Это видно, например, на диаграмме второго порядка



$$(4.47)$$

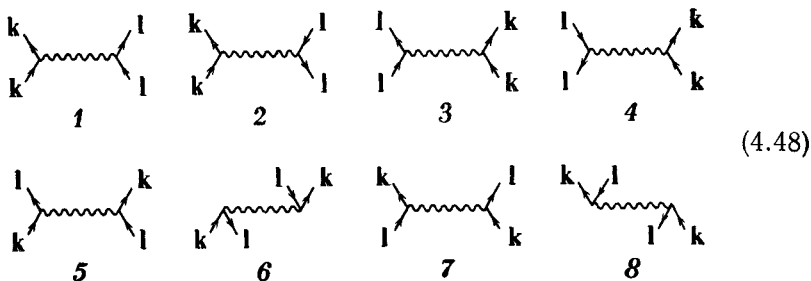
Рассматриваемая картина аналогична течению тока по цепи без стоков или источников: ток, входящий в цепь, равен току, выходящему. Поэтому надо рассматривать только функции Грина $G(\mathbf{k}, \mathbf{l}, t_2 - t_1)$ при $\mathbf{k} = \mathbf{l}$.

Здесь важно отметить, что, хотя при столкновениях и сохраняется полный импульс, энергия не сохраняется. Например, мы видим, что для нижнего взаимодействия на диаграмме (4.47) энергия на входе (в единицах $\hbar^2/2m$) равна $k^2 + l^2$, в то время как на выходе она составляет $(k - q)^2 + (l + q)^2$. Здесь, следовательно, мы имеем дело с *виртуальными*, а не с реальными процессами рассеяния.

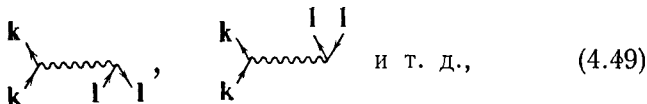
Теперь мы можем построить ряд теории возмущений для одночастичной функции Грина G^+ . Для этой цели надо составить сумму всех возможных различных диаграмм, состоящих из последовательности взаимодействий (4.43), соединенных линиями частиц или дырок так, чтобы частица, входящая в систему, и частица, выходящая из нее, находились в состоянии \mathbf{k} . Одной из таких последовательностей отвечает

диаграмма (4.47). Она изображает рассеяние *частицы* из k в $k - q$ с одновременным выбиванием частицы из l в $l + q$ (т. е. рождение *частицы* в состоянии $l + q$ и дырки в состоянии l). В более поздний момент времени t' *частица* в $k - q$ загоняет *частицу*, находящуюся в $l + q$ обратно в дырочное состояние l (вызывая таким образом аннигиляцию пары *частица* — дырка), а сама рассеивается в состоянии k . Это есть процесс второго порядка, ибо он связан с двумя актами взаимодействия.

Могут также иметь место несколько процессов первого порядка. Хотя они и проще процесса (4.47), так как включают лишь один акт взаимодействия, интерпретировать их физически значительно труднее. Посмотрим, к каким процессам первого порядка может привести взаимодействие (4.44). Поскольку начальное состояние одной частицы и конечное состояние другой есть k , закону сохранения полного импульса удовлетворяют только следующие диаграммы:



Такие диаграммы, как



не разрешены, так как они содержат *частицу* и дырку в одном и том же состоянии l , что невозможно: по определению, *частицы* существуют только выше, а дырки — только ниже k_F . Можно показать, что не появляются также и диаграммы 1, 3, 5 и 8 из (4.48).

Чтобы в этом убедиться, достаточно воспользоваться гамильтонианом H_1 в виде (4.28) Слагаемое в H_1 , соответствующее диаграмме 1, равно

$$V_{klkl} a_l^\dagger a_k^\dagger a_k a_l. \quad (4.50)$$

Действуя на состояние с волновой функцией входящей *частицы* ϕ_k , мы в соответствии с правилами (4.20) находим

$$V_{klkl} a_l^\dagger a_k^\dagger a_k a_l |1_k^p\rangle = 0. \quad (4.51)$$

Аналогичным образом не дают вклада и диаграммы 3, 5 и 8. Заметим, что член в H_1 , соответствующий, например, диаграмме 2, имеет вид

$$V_{klkl} b_l^\dagger a_k^\dagger a_k b_l^\dagger, \quad (4.52)$$

в соответствии с (4.20) это дает

$$V_{klkl} b_l^\dagger a_k^\dagger a_k b_l^\dagger |1_k^p\rangle = V_{klkl} |1_k^p\rangle \neq 0 \quad (4.53)$$

[Не следует думать, что на диаграммах 1—4 из (4.48) „ничего не происходит“ лишь потому, что частицы и дырки возникают точно в тех же импульсных состояниях, в которых они находились до рассеяния. Это было бы справедливо, только если бы мы имели дело с классическими частицами. На самом же деле в нашем квантовом случае все-таки что-то происходит: две частицы входят в систему в состояниях k, l , взаимодействуют друг с другом, но вместо того, чтобы рассеяться в новые состояния, отличные от k, l , они просто попадают снова в те же состояния k и l . То же происходило и в квантовом детском бильярде, когда потенциал V_{Mkk} рассеивал частицу из состояния k опять в состояние k .]

Воспользовавшись диаграммами 2, 4, 6 и 8 из (4.48), изобразим теперь возможные процессы первого порядка. Это можно сделать только одним способом — соединив выходящую и входящую l -линии (в противном случае с диаграммой оказались бы связанными как *частица*, так и дырка, что противоречило бы определению одночастичной функции Грина или мы должны были бы ввести еще другие линии взаимодействия и процесс оказался бы более высокого порядка). Таким образом, мы получаем

$$a \quad \text{пузыри} \quad b \quad (4.54)$$

$$b \quad \text{ОТКРЫТЫЕ УСТРИЦЫ} \quad g \quad (4.55)$$

[Закрытые устрицы уже появлялись в (1.47).]

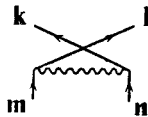
Процессы, изображаемые „пузырями“, можно интерпретировать физически следующим образом: *частица* входит с импульсом k в момент времени t , выбивает частицу из состояния l ($|l| < k_F$), затем немедленно (в тот же момент t) возвращает эту частицу в состояние l и продолжает свобод-

ное движение в состоянии k . Следовательно, дырка, созданная в состоянии l , живет только нуль секунд, и никакой сопровождающей ее *частицы* просто нет. Конечно, мгновенные процессы вроде этого изобразить невозможно, и картинка с „пузырем“ является чисто схематической. Этот процесс называется также *рассеянием вперед*, потому что после рассеяния частица движется в том же направлении (т. е. в состоянии с тем же импульсом), что и до рассеяния. [Напомним еще раз замечание после формулы (4.53): действительно, что-то „произошло“ в этих процессах рассеяния вперед!]

Эти „пузыри“ выглядят так странно, что может показаться неестественным приписывать им физический смысл. Дело здесь вот в чем. Если в случае классического детского бильярда каждая диаграмма описывала некоторый реальный физический процесс, то квантовые диаграммы описывают только то, что можно было бы назвать *квазифизическими* процессами. Это будет еще обсуждаться в следующем параграфе. А в конце приложения VII мы строго докажем, что „пузырь“ представляет собой вполне законную диаграмму.

Процессы, описываемые „открытыми устрицами“, несколько похожи на те, которые изображаются „пузырями“. Есть, однако, и разница. Она состоит в том, что здесь происходит быстрая замена действующих лиц: в момент времени t влетающая *частица* одновременно а) соударяется с частицей в состоянии l , б) создает на мгновение дырку в l и в) меняется местами с частицей из l . Диаграммы (4.55) часто называют *обменными диаграммами* первого порядка, а о самих этих процессах говорят как об *обменном рассеянии*. Мгновенные дырочные линии в пузырях и в открытых устрицах называются *нераспространяющимися*.

Отметим, что ситуация, показанная на диаграммах (4.54) и (4.55), носит общий характер. Иными словами, каждый раз, когда на диаграмме появляется взаимодействие вида (4.43), существует и другая возможная диаграмма, в которой импульсы двух выходящих (или входящих) частиц меняются местами. Обычно это изображают так:



Например, диаграмма 5 из (4.63) — обменная по отношению к диаграмме 4.

Посмотрим теперь, как вычисляются вклады от этих диаграмм. Рассмотрим сначала пузыри. С помощью словаря

табл. 6 и равенства (4.43) находим

$$t \begin{array}{c} \uparrow k \\ \text{---} \\ \downarrow k \end{array} \begin{array}{c} t_2 \\ \text{---} \\ t_1 \end{array} \text{---} \bigcirc \text{---} \text{I} = (-1) \sum_{l < k_F} \int_{-\infty}^{+\infty} dt [iG_0^+(\mathbf{k}, t - t_1)] \times \left[-\frac{i}{2} V_{klkl} \right] \times \\ \times [iG_0^-(\mathbf{l}, t - t)] \times [iG_0^+(\mathbf{k}, t_2 - t)]. \quad (4.56)$$

Здесь, как и в выражении (4.36), мы проинтегрировали по „промежуточным“ временам t и просуммировали по „промежуточным“ импульсам l . Дополнительный множитель (-1) спереди появляется из-за того, что диаграмма содержит одну „фермионную петлю“, именно \bigcirc . [Фермионной петлей называется любая совокупность сплошных линий на диаграмме, по которой можно, двигаясь в направлении стрелки, вернуться в исходную точку, не отрывая карандаша от бумаги. Например, линии $l, l + \mathbf{q}$ на диаграммах (4.47) образуют фермионную петлю.] Это один из тех назойливых „фазовых множителей“, которые появляются при строгом математическом построении теории (см. конец приложения VII). Еще один множитель (-1) возникает из-за того, что линии функции Грина в пузыре соответствует величина

$$iG_0^-(\mathbf{l}, t - t) = i \times ie^{-i\epsilon_l \times 0} = -1. \quad (4.57)$$

В выражении (4.56) можно перейти к фурье-трансформантам в точности так же, как и в случае детского бильярда (2.23). Это дает

$$\begin{array}{c} \mathbf{k}, \omega \\ \uparrow \\ \text{---} \\ \downarrow \\ \mathbf{k}, \omega \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \bigcirc \text{---} \text{I} = (-1) [iG_0^+(\mathbf{k}, \omega)]^2 \sum_{l < k_F} \left[-\frac{i}{2} V_{klkl} \right] (-1). \quad (4.58)$$

Множитель (-1) после V_{klkl} возникает в силу формулы (4.57) и соответствует нераспространяющейся пузырьковой линии как в (\mathbf{k}, ω) -, так и в (\mathbf{k}, t) -пространстве. Обратите внимание: мы не можем получить выражение (4.58), просто воспользовавшись словарем табл. 6 для (\mathbf{k}, ω) -пространства! Это потому, что пузыри (и открытые устрицы) представляют собой особые случаи.

Подобным же образом для перевернутого пузыря мы имеем

$$\bigcirc \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \mathbf{k}, \omega \\ \downarrow \mathbf{k}, \omega \end{array} = (-1) [iG_0^+(\mathbf{k}, \omega)]^2 \sum_{l < k_F} \left(-\frac{i}{2} \right) V_{lklk} (-1). \quad (4.59)$$

Но, как видно из формулы (4.42), $V_{klkl} = V_{lklk}$; следовательно, обе такие диаграммы эквивалентны. Этот вывод имеет довольно общий характер и мы можем сформулировать следующее правило:

Если мы образуем новую диаграмму из данной путем поворота одной или более ее линий взаимодействия на 180° , то новая диаграмма будет тождественна исходной. Поэтому все повернутые диаграммы можно опустить, одновременно умножая правую часть (4.43) на 2. (4.60)

Так, например, из диаграмм

(4.61)

надо сохранить только первую.

Подобно (4.59), для открытой устрицы мы получаем

$$k, \omega \left| \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{wavy line} \\ \downarrow \end{array} \right| k, \omega = [iG_0^+(k, \omega)]^2 \sum_{l < k_F} (-i) V_{lklk} (-1). \quad (4.62)$$

Множитель 2, рекомендуемый правилом (4.60), здесь уже учтен.

Энергетический параметр ω у линии функции Грина, выходящий из вершины на диаграммах (4.59) и (4.62), такой же, как и у входящей. Этот частный случай иллюстрирует общее правило *сохранения энергетического параметра*. То же самое мы видели и в модели детского бильярда (2.23) и (2.25). Это есть просто следствие того факта, что гамильтониан не зависит от времени, и потому функция Грина зависит лишь от разности времен. В результате появляются δ -функции $2\pi\delta(\omega' - \omega)$, как в формуле (2.23). Сохранение энергетического параметра можно учесть в обозначениях диаграмм в (k, ω) -пространстве

$$\begin{array}{c} k, \omega \\ k - q \\ \omega - \epsilon \\ k, \omega \end{array} \left| \begin{array}{c} q, \epsilon \\ \text{wavy line} \\ \text{loop} \\ \text{wavy line} \\ q, \epsilon \end{array} \right| \begin{array}{c} l, \beta \\ l + q \\ \beta + \epsilon \end{array} \quad (4.62a)$$

Все импульсы и энергетические параметры, кроме входящих и выходящих, называются „промежуточными“. Так, на диаграмме (4.62 а) промежуточными являются импульсы q и l и энергетические параметры β и ϵ . Заметим, что каждой волнистой линии удобно приписать энергетический параметр, хотя само взаимодействие и не зависит от ω .

Не путайте энергетический параметр линии с энергией частицы! Например, на линии k , ω энергетический параметр есть ω , в то же время как энергия частицы $\epsilon_k = k^2/2m$. Кроме того, энергетический параметр сохраняется, а энергия данной частицы — нет.

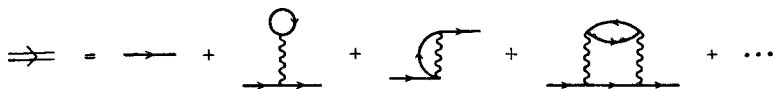
Теперь мы можем собрать воедино всю информацию из табл. 6, соотношений (4.43), (4.57) и правила (4.60) и составить полный словарь для системы многих ферми-частиц с взаимодействием. Этот словарь приведен в табл. 7. Теперь полный ряд для G^+ есть просто сумма всех возможных диаграмм, таких, как (4.47), 4.54) и т. д. В гл. 9 будет показан систематический способ перебора всех возможностей; здесь же мы только изобразим несколько характерных диаграмм [для простоты в (k, ω) -пространстве]:

$$\begin{aligned}
 k, \omega \parallel &= \underset{1}{\parallel} + \underset{2}{\parallel} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} P \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \underset{3}{\text{---}} + \underset{4}{\text{---}} + \underset{5}{\text{---}} + \\
 &+ \underset{6}{\text{---}} + \dots + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \\
 &+ \text{---} + \text{---} + \dots + \text{---} + \dots \quad (4.63)
 \end{aligned}$$

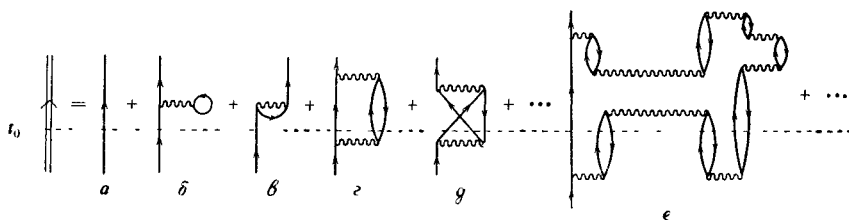
Таблица 7
 Диаграммный словарь для многофермионной системы с взаимодействием
 в отсутствие внешнего поля (метод Голдстоуна)

(k, t)-пространство		(k, ω)-пространство	
Слово	Диаграмма	Слово	Диаграмма
$iG^{\pm}(k, t_2 - t_1)$ [см. (3.2), (4.29)]		$iG^{\pm}(k, \omega)$	
$iG_0^+(k, t_2 - t_1) = \theta_{t_2 - t_1} e^{-i\epsilon_k(t_2 - t_1)}$		$iG_0^+(k, \omega) = \frac{i}{\omega - \epsilon_k + i\delta}$	
$iG_0^-(k, t_2 - t_1) = -\theta_{t_1 - t_2} e^{-i\epsilon_k(t_2 - t_1)}$		$iG_0^-(k, \omega) = \frac{i}{\omega - \epsilon_k - i\delta}$	
Нераспространяющаяся линия		Нераспространяющаяся линия	
$iG_0^-(k, t_2 - t_2) = \begin{cases} -1, & k < k_F \\ 0, & k > k_F \end{cases}$		$iG_0^-(k) = \begin{cases} -1, & k < k_F \\ 0, & k > k_F \end{cases}$	
Множитель (-1)		Множитель -1	
$-iV_{klmn}$ или $-iV_q$ [см. (4.42), (4.46)]		$-iV_{klmn}$ или $-iV_q$	
$\sum_k \int dt$	Все промежуточные k, t	$\sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi}$	Все промежуточные k, ω

Такие диаграммы часто называют *собственно-энергетическими*, так как они описывают взаимодействие частицы с многочастичной средой, которая в свою очередь обратно воздействует на частицу, изменяя ее энергию [см. замечание после соотношения (2.5)]. Следует отметить, что многие авторы изображают эти диаграммы в лежачем положении



Диаграммы можно интерпретировать физически еще и с другой точки зрения. Посмотрим на диаграммы в (\mathbf{k}, t) -пространстве в определенный момент времени t_0



(4.64)

В момент t_0 в системе, кроме „голой“ частицы, существуют еще две „виртуальные“ частицы плюс одна дырка, возникшие в процессе второго порядка δ , две частицы и дырка от следующего процесса второго порядка δ и т. д., частица плюс три пары частица — дырка, возникшие в процессе восьмого порядка, изображаемом „пуделем“ (диаграмма e), — типичном процессе высшего порядка. Иными словами, на диаграммах показаны все частицы и дырки, выбиваемые „голой“ частицей, пока она продирается сквозь сферу Ферми. Поскольку (как будет доказано в гл. 11) функция Грина (4.64) описывает квазичастицы, диаграммы выявляют состав облака из частиц и дырок, окружающего „голую“ частицу и превращающего ее в квазичастицу.

Соотношение (4.63) с помощью табл. 7 можно записать на языке функций в виде

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = G_0^+(\mathbf{k}, \omega) + (-1) G_0^+(\mathbf{k}, \omega)^2 \sum_{p < k_F} V_{kp kp} (-1) + \\ + G_0^+(\mathbf{k}, \omega)^2 \sum_{m < k_F} V_{km mk} (-1) + \dots \quad (4.65)$$

§ 6. „Квазифизическая“ природа диаграмм Фейнмана

В случае классического детского бильярда каждая индивидуальная диаграмма в ряду теории возмущений для функции Грина описывала реальный физический процесс. Используя „физическую интуицию“, основанную на аналогии с классическим случаем, мы построили диаграммное разложение (3.32) для квантовой функции Грина в одночастичной системе и (4.34) и (4.63) — в системах многих частиц без взаимодействия и с взаимодействием. Наш интуитивный метод фактически очень похож на тот, которым пользовался Фейнман, впервые вводя диаграммы в квантовую электродинамику [18].

Однако к настоящему времени читатель уже несомненно убедился, что диаграммы Фейнмана описывают процессы, значительно менее „реальные“, нежели те, что соответствуют диаграммам в случае классического детского бильярда. Например, рассматривая одну частицу во внешнем поле, трудно было себе представить, каким образом частица могла бы рассеяться потенциалом несколько раз, ведь она все время находилась под влиянием потенциала! Далее в случае системы невзаимодействующих фермионов появлялись диаграммы, в которых игнорировался принцип запрета Паули. В системе с взаимодействием мы встретились с простыми пузырями и с устрицами, которые на первый взгляд вообще не допускали никакой физической интерпретации с позиции „здорового смысла“. Наконец, мы обнаружили, что диаграммы более высокого порядка описывают скорее „виртуальные“, чем реальные процессы.

Тем не менее положение не так уже плохо, как могло бы показаться на первый взгляд. Дело в том, что нефизическими свойствами обладают только индивидуальные диаграммы, а не их сумма как целое. Действительно, полная функция Грина G^+ описывает настоящий физический эксперимент, например упругое рассеяние одного нуклона на ядре, находящемся в основном состоянии [64]. Это означает, что нефизические аспекты возникают как следствие определенного способа разложения функции Грина в ряд теории возмущений. Аналогичная ситуация возникает и при разложении зависящего от времени периодического электрического сигнала $E(t)$ в ряд Фурье

$$E(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n e^{in\pi t/T}.$$

Сам сигнал — действительная величина, но все его компоненты комплексные и, следовательно, „нефизические“.

Из-за нефизических свойств диаграмм Фейнмана многие авторы вовсе не дают им никакой физической интерпретации, а просто рассматривают их как мнемонический аппарат, позволяющий написать любой член ряда теории возмущений. Однако диаграммы так образно говорят „о чем-то физическом“, что кажется несколько несправедливым отказываться от какой-бы то ни было физической их интерпретации. Как отмечается в книге [32], обратившись к истории физики, мы найдем только один мнемонический аппарат — „силовые линии“ Фарадея, — который по своей интуитивной силе мог бы сравниться с фейнмановскими диаграммами. Поэтому мы будем придерживаться компромиссной линии: „будем говорить“ о диаграммах так, как если бы они были физическими, помня при этом, что на самом деле они только кажутся таковыми, а фактически являются *квазифизическими*.

Так как диаграммы для квантовой функции Грина описывают только квазифизические процессы, в то время как диаграммы классического детского бильярда описывают процессы настоящие, остается еще один важный вопрос: как можно оправдать построение квантовых разложений по аналогии с классическими? Очевидно, единственный удовлетворительный ответ на поставленный вопрос — вывод диаграммного разложения непосредственно из уравнения Шредингера. Для одночастичного случая это проделано в конце гл. 3. Такое обоснование можно дать и в случае системы многих тел, но, к сожалению, путь так долог и проходит по такому лабиринту, что средний неспециалист скорее всего совершенно в нем заблудится. Именно по этой причине мы и предпочитаем в основном тексте пользоваться интуитивным подходом, а строгий вывод привести в приложениях. Однако для тех, кому очень уж не по себе от интуитивных аргументов, мы предлагаем следующую альтернативу:

ВАЖНО!

Те читатели, которые хотели бы, прежде чем двигаться дальше, посмотреть строгий вывод многочастичных диаграмм, должны оставить прямой путь через книгу и пройти по следующему маршруту:

§ 6 гл. 4 → гл. 7 (вторичное квантование) → § 1 и 2 гл. 9 (математическое определение функции Грина) → приложения II — VII (вывод диаграмм)¹⁾ → § 7 гл. 4 и дальше.
Остальные читатели могут переходить прямо к § 7.

¹⁾ Следует опустить приложение III и все, что относится к „вакуумной амплитуде“ или к „конечной температуре“.

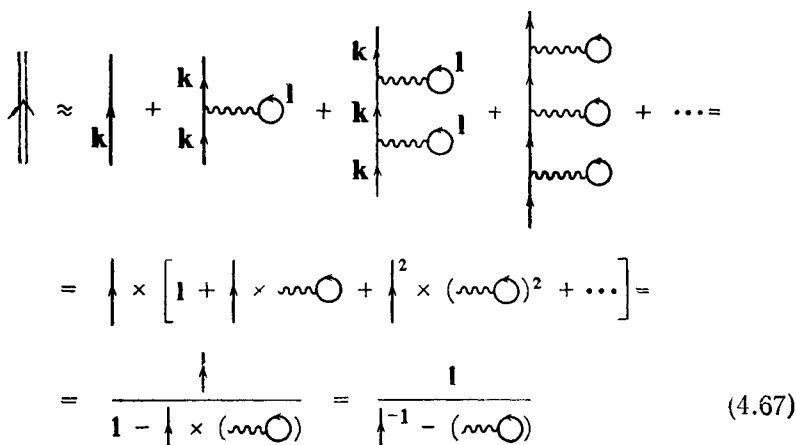
§ 7. Квазичастицы в приближениях Хартри и Хартри — Фока

Обратимся к самым простым из всех типов частичного суммирования — к приближениям Хартри и Хартри — Фока. Представим себе гипотетическую систему без внешнего потенциала, но с взаимодействием между частицами, которое проявляется главным образом в процессах рассеяния вперед (тогда обе частицы после взаимодействия имеют те же импульсы, что и до него). Найдем для этого случая закон дисперсии элементарных возбуждений (квазичастиц). Расчет будет сводиться к приближенному вычислению функции Грина путем отбора в (4.63) наиболее важной для данной системы совокупности диаграмм и последующего суммирования всех таких диаграмм вплоть до бесконечного порядка.

Запишем сначала матричные элементы энергии взаимодействия V_{klmn} , фигурирующие в формулах (4.43) и (4.44). Главную роль играет член, ответственный за сильное рассеяние вперед; поэтому

$$V_{klmn} = \delta_{mk}\delta_{nl} \underbrace{V_{klkl}}_{\text{Большая величина}} + \underbrace{W_{klmn}}_{\text{Малая величина}} \quad (m \neq k, n \neq l). \quad (4.66)$$

Таким образом, среди диаграмм (4.48) наиболее важными являются диаграммы 1—4, описывающие рассеяние вперед. Соответственно и в сумме (4.63) будут доминировать диаграммы, в которых каждое взаимодействие относится к этому типу. Попробовав несколько вариантов, мы убедимся, что единственные диаграммы такого типа — это как раз диаграммы, содержащие только пузыри. Следовательно, функцию Грина можно аппроксимировать частичной суммой по всем повторяющимся пузырям:



$$= \frac{\uparrow}{1 - \uparrow \times (\text{bubble})} = \uparrow^{-1} - (\text{bubble}) \quad (4.67)$$

Подставляя сюда функции Грина из табл. 7, получаем

$$iG^+(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{[iG_0^+(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} - (-1) \sum_{l < k_F} (-iV_{klkl})(-1)}, \quad (4.68)$$

или

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \sum_{l < k_F} V_{klkl} + i\delta}. \quad (4.69)$$

Сравнивая это выражение с формулой (3.16), видим, что мы имеем здесь дело с долгоживущими „многочастичными“ квазичастицами; их закон дисперсии и время жизни даются равенствами

$$\varepsilon'_k = \varepsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{klkl}, \quad \tau_k = \frac{1}{\delta} = \infty. \quad (4.70)$$

Величина $\sum_{l < k_F} V_{klkl}$ есть „собственная энергия“ квазичастицы в том смысле, как об этом говорилось после соотношения (2.5).

Результат (4.70) имеет простой физический смысл. Прежде всего заметим, что у диаграммного ряда (4.67) в точности такой же вид, как и у ряда (3.33) для одной частицы, движущейся во внешнем поле, причем величина

$$\text{wavy circle} \equiv (-1) \sum_{l < k_F} (-i) V_{klkl} (-1) \quad (4.71)$$

играет ту же роль, что и

$$\text{circle with M} \equiv -iV_{M_{kk}}. \quad (4.72)$$

Таким образом, выражение (4.71) можно интерпретировать как вероятность перехода $\phi_k \rightarrow \phi_k$ при рассеянии на „эффективном внешнем потенциале“ $v_{\text{эфф}}$. Этот потенциал легко найти, расписав подробнее выражение (4.71) с помощью (4.42):

$$\sum_{l < k_F} V_{klkl} = \int d^3r \phi_k^*(\mathbf{r}) \left\{ \underbrace{\sum_{l < k_F} \int |\phi_l(\mathbf{r}')|^2 V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r'}_{v_{\text{эфф}}} \right\} \phi_k(\mathbf{r}). \quad (4.73)$$

Сравнение с (4.33) показывает, что величина в фигурных скобках и равна как раз $v_{\text{эфф}}$. Так как $|\phi_l(\mathbf{r}')|^2$ есть плот-

ность вероятности обнаружить в точке \mathbf{r}' частицу, находящуюся в состоянии ϕ_l , то $v_{\text{эфф}}$ представляет собой, очевидно, средний потенциал, создаваемый в точке \mathbf{r} всеми частицами сферы Ферми. (В данном случае, поскольку функции ϕ_l суть плоские волны, потенциал $v_{\text{эфф}}$ не зависит от \mathbf{r} .)

Напомним, что для квантового детского бильярда энергию квазичастиц (3.38) можно найти как с помощью диаграммного метода, так и непосредственно из уравнения Шредингера с гамильтонианом (3.20). В настоящем случае легко написать уравнение Шредингера с собственными значениями энергии ϵ'_k , просто считая внешний потенциал равным $v_{\text{эфф}}$:

$$\left[\frac{p^2}{2m} + v_{\text{эфф}}(\mathbf{r}) \right] \phi_k(\mathbf{r}) = \epsilon'_k \phi_k(\mathbf{r}). \quad (4.74)$$

Легко проверить, что это правильно: умножим обе части уравнения на $\phi_k^*(\mathbf{r})$ и проинтегрируем — в результате получим соотношение (4.70).

Выводя с помощью интуитивных соображений уравнение (4.74), мы считали функции ϕ_k заданными (плоские волны). Однако если их рассматривать как собственные функции, подлежащие определению, то уравнение (4.74) превратится в не что иное, как знаменитое уравнение Хартри. Напомним, что в силу (4.73) потенциал $v_{\text{эфф}}$ зависит от всех ϕ_k . Это означает, что последние функции надо вычислять *самосогласованно*, т. е. подставить выбранные ϕ_k в $v_{\text{эфф}}$, найти из уравнения (4.74) новые функции ϕ_k , подставить их в $v_{\text{эфф}}$, опять вычислить из (4.74) ϕ_k и т. д., пока функции ϕ_k не перестанут существенно меняться. В данном случае в отсутствие внешнего поля мы немедленно находим, что правильные функции ϕ_k суть плоские волны. Однако в системе с внешним потенциалом, например в атоме, должна проводиться полная процедура самосогласования. Дальнейшую дискуссию на эту тему см. в § 1 гл. 11.

Осталось сделать лишь маленький детский шаг, и мы получим квазичастицы в приближении Хартри — Фока (HF).

Пусть в рассматриваемой гипотетической системе обменное рассеяние так же важно, как и рассеяние вперед, т. е.

$$V_{klmn} = \delta_{mk} \delta_{nl} V_{klkl} + \delta_{ml} \delta_{nk} V_{kllk} + \text{Малые члены}. \quad (4.75)$$

Тогда в приближенное выражение для функции Грина надо включить и открытые устрицы. Частичная сумма вычисляется

при этом так же, как и в случае (3.39):

$$\begin{aligned}
 & \left[\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} + \dots \right] \\
 &= \left[1 + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} + \dots \right] \\
 &= \left[1 + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} + \dots \right] \\
 &= \frac{1}{1 - (\text{Diagram 2} + \text{Diagram 3})} = \frac{1}{1 - (\text{Diagram 2} + \text{Diagram 3})} \quad (4.76)
 \end{aligned}$$

Перевод с помощью словаря табл. 7 дает

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \sum_{l < k_F} (V_{klkl} - V_{lkkl}) + i\delta}. \quad (4.77)$$

Выражение (4.77) имеет квазичастичный вид, причем

$$\varepsilon'_k = \varepsilon_k + \sum_{l < k_F} (V_{klkl} - V_{lkkl}), \quad \tau_k = \infty. \quad (4.78)$$

Это есть энергия и время жизни квазичастицы в приближении Хартри — Фока. Величина V_{lkkl} представляет собой хорошо известный „обменный член“. Как и в случае приближения Хартри, мы можем теперь построить уравнение Шредингера, содержащее эффективный внешний „обменный“ потенциал. Мы получим не что иное, как уравнение Хартри — Фока. [Отметим, что в нашем случае, когда внешнее реальное поле отсутствует, плоские волны представляют собой самосогласованные решения уравнения Хартри — Фока, так же как и в случае уравнения Хартри (4.74).] Следует упомянуть, что вследствие грубости приближения Хартри — Фока время жизни квазичастиц оказывается бесконечным. Более точные аппроксимации, учитывающие диаграммы типа (4.47), приводят к конечным временам жизни.

§ 8. Квазичастицы Хартри — Фока в ядерной материи

В реальных физических системах взаимодействие оказывается значительно более сложным, чем в гипотетической модели предыдущего параграфа, когда учитывается только

„рассеяние вперед и обмен“. Тем не менее аппроксимацию Хартри — Фока можно использовать как очень грубое „первое приближение“ для функции Грина. Сейчас мы покажем это на примере ядерной материи.

Ядерная материя — это *не* то, из чего состоит ядро. Это есть нечто *гипотетическое*, состряпанное следующим образом (подробности см. в книге [64])¹⁾. На основе „капельной“ модели ядра Вайцзекер построил известную „полуэмпирическую массовую формулу“ для энергии связи ядра

$$E(N, Z) = - \underbrace{a_1 A}_{\text{Ядерные силы}} + \underbrace{a_2 A^{2/3}}_{\text{Поправка за счет поверхности}} + \underbrace{a_3 Z^2 A^{-1/3}}_{\text{Кулоновские силы}} + \underbrace{\frac{1}{4} a^4 (N - Z)^2 / A}_{\text{Поправка за счет принципа Паули}}. \quad (4.79)$$

Здесь N и Z — числа нейтронов и протонов соответственно; $A = N + Z$; a_i — константы, определяемые путем подгонки величины (4.79) к известным значениям массы ядер. В первом члене параметр $-a_1$ есть энергия связи одного нуклона, расположенного достаточно глубоко внутри ядра (т. е. не вблизи поверхности). Она обусловлена ядерными силами притяжения и оказывается порядка $-15,9$ Мэв. Второй, третий и четвертый члены в формуле (4.79) — это поправки, учитывающие соответственно наличие поверхности ядра, кулоновские силы между протонами и принцип Паули.

Если бы не было кулоновских сил, если бы число нуклонов было столь велико, что ядро имело бы размеры, скажем, кокосового ореха и, следовательно, поверхностным членом можно было бы пренебречь по сравнению с первым слагаемым в (4.79), и если бы числа протонов и нейтронов были одинаковыми ($N = Z$), то мы имели бы дело с простой системой, энергия связи которой пропорциональна числу нуклонов A . Такая гипотетическая система, состоящая из огромного числа протонов и равного ему числа нейтронов, взаимодействующих с чисто ядерными силами (без кулоновских), и называется *ядерной материей*. Эта система представляет большой интерес, потому что расчет энергии связи ядра с использованием некоторой модели ядерных сил дает, очевидно, параметр $-a_1$, и результат можно сравнить с экспериментальным значением $-15,9$ Мэв.

¹⁾ См также [69]. — *Прим ред.*

Допустим, что потенциальная энергия взаимодействия нуклонов имеет вид простого потенциала Юкавы

$$V = -V_0 \frac{e^{-|r-r'|/a}}{|r-r'|/a}. \quad (4.80)$$

(Ясно, что такое чистое притяжение есть научная фантастика, ибо оно привело бы к сжатию ядерной материи в точку. Последнего можно избежать, если, как описано в § 4 гл. 12, добавить в потенциал „твердую сердцевину“.) Величина a ($\sim 10^{-13}$ см) называется „радиусом“ взаимодействия; экспонента становится очень малой при $|r-r'| > a$.

Энергию квазичастиц в приближении Хартри — Фока можно вычислить [10] по формулам (4.78) и (4.80). Заметим, что плотность точек в \mathbf{k} -пространстве есть $\Omega/(2\pi)^3$, где Ω — нормировочный объем (который мы полагаем равным 1 см^3). Переходя от суммирования к интегрированию по правилу

$$\sum_l \rightarrow \int \frac{d^3l}{(2\pi)^3}, \quad (4.81)$$

получаем

$$\epsilon'_k = \frac{k^2}{2m} + \int_{|l| < k_F} \frac{d^3l}{(2\pi)^3} (V_{klkl} - V_{lkkl}). \quad (4.82)$$

Матричный элемент V_{klmn} вычисляется с помощью соотношений (3.5), (4.42), (4.45) и (4.80):

$$\begin{aligned} V_{klmn} &= -V_0 \int \int d^3r d^3r' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{m}) \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/a}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|/a} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{l}, \mathbf{m}+\mathbf{n}} = \\ &= -\frac{4\pi V_0 a^3 \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{l}, \mathbf{m}+\mathbf{n}}}{1 + (\mathbf{k}-\mathbf{m})^2 a^2} = -\frac{4\pi V_0 a^3 \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{l}, \mathbf{m}+\mathbf{n}}}{1 + (k^2 + m^2 - 2km \cos \theta) a^2}, \end{aligned} \quad (4.83)$$

где θ — угол между \mathbf{k} и \mathbf{m} . Следовательно,

$$V_{klkl} = -4\pi V_0 a^3, \quad V_{lkkl} = -\frac{4\pi V_0 a^3}{1 + (l^2 + k^2 - 2kl \cos \theta) a^2}. \quad (4.84)$$

Мы можем вычислить энергию ϵ_k для случая малых \mathbf{k} , разлагая выражение (4.84) в ряд по степеням \mathbf{k} вблизи точки $\mathbf{k} = 0$ и подставляя результат в (4.82). Член, линейный по \mathbf{k} , исчезает, и в результате получаем

$$\epsilon'_k = \frac{k^2}{2m} + V^{(0)} + V^{(2)} k^2 = V^{(0)} + \frac{1}{2 \left[\frac{m}{1 + 2mV^{(2)}} \right]} k^2. \quad (4.85)$$

Здесь

$$V^{(0)} = -\frac{1}{2\pi^2} V_0 a^3 \int_0^{k_F} \left(1 - \frac{1}{1+l^2 a^2}\right) \cdot 4\pi l^2 dl, \quad (4.86)$$

$$V^{(2)} = -\frac{1}{2\pi^2} V_0 a^5 \int_0^{k_F} \frac{1}{(1+l^2 a^2)^2} \left[1 - \frac{4l^2 a^2}{3(1+l^2 a^2)}\right] \cdot 4\pi l^2 dl.$$

Очевидно, мы получили квазичастицы с эффективной массой

$$m^* = \frac{m}{1 + 2mV^{(2)}}. \quad (4.87)$$

Соотношение (4.87) справедливо также для случая $|\mathbf{k}| \approx k_F$, когда величина a достаточно мала, так что $k_F a \ll 1$ (это не слишком хорошее допущение, если речь идет о настоящей ядерной материи!). Тогда выражение (4.87) имеет простой вид

$$\lim_{k_F a \ll 1} m^* = \frac{m}{1 - \frac{4}{3} m V_0 a^5 k_F^3}. \quad (4.88)$$

§ 9. Квазичастицы в электронном газе и приближение случайных фаз

Реальный металл состоит из примерно 10^{23} см^{-3} положительно заряженных ионов, расположенных в виде правильной решетки, и примерно 10^{23} см^{-3} электронов, движущихся более или менее свободно вокруг этих ионов. Ионы совершают колебания около своих положений равновесия („колебания решетки“). Такая сложная система ставит перед специалистом по задаче многих тел довольно скверные проблемы. Чтобы облегчить себе существование, этот специалист часто постулирует утопический металл, в котором ионы неподвижны, а положительный заряд их размазан таким образом, что образует постоянный, однородный положительный фон, на котором и движутся электроны. Предполагается, что взаимодействие электронов чисто кулоновское. Эта воздушная мечта теоретика называется „электронным газом“.

Рассмотрим сначала электронный газ в приближении Хартри — Фока. Кулоновский потенциал и его матричный элемент [см. (7.71)] даются выражениями

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (4.89a)$$

$$V_{klmn} = \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{m}|^2}. \quad (4.89б)$$

Здесь, простоты ради, опущен спин и принято $\Omega = 1 \text{ с.м}^3$. Отметим, что выражение (4.89б) [или (4.89а)] имеет вид (4.83) [или (4.80)] при $a \rightarrow \infty$. Иначе говоря, кулоновский потенциал имеет вид потенциала Юкавы с „бесконечным радиусом“ взаимодействия. С другой стороны, часто говорят, что потенциал Юкавы — это экранированный кулоновский потенциал, а множитель $\exp(-r/a)$ в (4.80) именуют „экранирующим фактором“. Заметим также, что матричный элемент (4.89) становится бесконечным при $\mathbf{k} = \mathbf{m}$, в то время как выражение (4.83) при этом остается конечным.

Энергию квазичастиц можно вычислить точно так же, как и в случае ядерной материи. Небольшое упрощение возникает из-за того, что пузырьковые диаграммы в ряду (4.76) компенсируются фоном положительного заряда (см. § 4 гл. 10). Таким образом,

$$\begin{array}{c} \parallel \\ \text{НФ (ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ)} \end{array} = \frac{1}{\begin{array}{c} -1 \\ \uparrow \\ \text{---} \end{array}} \quad (4.90)$$

Выражение для энергии квазичастиц при этом принимает вид [55]

$$\epsilon'_k = \frac{k^2}{2m} + \frac{e^2 k_F}{2\pi} \left(2 + \frac{k_F^2 - k^2}{kk_F} \ln \left| \frac{k + k_F}{k - k_F} \right| \right). \quad (4.91)$$

Мы интересуемся главным образом квазичастицами вблизи $k = k_F$, так как именно они в основном принимают участие в физических процессах. При этом эффективную массу можно найти, разлагая энергию ϵ'_k в ряд по разности $(k - k_F)$:

$$\epsilon'_k = \epsilon'_{k_F} + \left(\frac{\partial \epsilon'_k}{\partial k} \right)_{k_F} (k - k_F) + \dots; \quad (4.92)$$

здесь $k = |\mathbf{k}|$.

Для системы невзаимодействующих частиц

$$\epsilon_k = \frac{k_F^2}{2m} + \frac{k_F}{m} (k - k_F) + \dots \quad (4.93)$$

Сравнивая формулы (4.92) и (4.93), мы можем определить эффективную массу равенством

$$\frac{k_F}{m^*} = \left(\frac{\partial \epsilon'_k}{\partial k} \right)_{k_F} \quad \text{или} \quad m^* = \frac{k_F}{\left(\frac{\partial \epsilon'_k}{\partial k} \right)_{k_F}}. \quad (4.94)$$

Подставляя сюда функцию ϵ'_k из (4.91), получаем

$$m_{\text{HF}}^* (\text{электронный газ}) = 0! \quad (4.95)$$

Этот результат, конечно, абсурден. Из него следует, например, что для прохождения электронов сквозь металл не надо накладывать никакого электрического напряжения, т. е. что все металлы — сверхпроводники!

Можно указать причину, по которой кулоновское взаимодействие в отличие от потенциала Юкавы приводит к нулевой эффективной массе на поверхности Ферми. Она состоит в том, что, как уже отмечалось, кулоновский потенциал обращается в бесконечность при нулевой передаче импульса. Приближение Хартри — Фока непригодно для рассмотрения таких сингулярных взаимодействий.

Физически это связано с тем, что в данном приближении влияние всех других частиц на пробную частицу сводится к не зависящему от времени среднему полю. Но мы знаем из § 1 гл. 2, что квазичастица есть „голая“ частица плюс облако, которое в некотором смысле „следует“ за ней. Приближение Хартри — Фока дает нам, таким образом, то, что могло бы быть названо „статической“ частью этого облака, но не позволяет ухватить его „движущуюся“ часть.

Обычно об этом обстоятельстве говорят, как о пренебрежении „корреляциями“. Это означает, что в приближении Хартри — Фока не учитывается движение других частиц, которое „скоррелировано“ с („следует“ за) движением „голой“ частицы. Как уже упоминалось в § 1 гл. 2, можно ожидать, что эти корреляции приводят к „экранированию“ взаимодействия между частицами, делая его значительно более слабым. Диаграммный метод, который мы сейчас (очень кратко) обсудим, позволяет рассчитать этот эффект экранирования.

Каким образом можно учесть корреляции с помощью диаграмм? Очевидно, корреляционные эффекты должны содержаться в тех диаграммах, которые мы опустили в приближении Хартри — Фока. Конечно, все отброшенные диаграммы учесть невозможно, но мы можем по крайней мере просуммировать наиболее важные из них.

Оказывается (это будет показано в § 4 гл. 10), что в пределе электронного газа высокой плотности наиболее существенны диаграммы, появляющиеся в следующей аппроксимации

для функции Грина:

(4.96)

Эти диаграммы называются „кольцевыми“, так как образованы из повторяющихся частей типа

(4.97)

все они имеют кольцеобразную структуру. Аппроксимация (4.96) называется „приближением случайных фаз“ или RPA.

В гл. 10 будет показано, что ряд (4.96) можно просуммировать и получить следующий результат:

(4.98)

Здесь

(4.99)

Переводя последнее выражение на язык функций и рассматривая предел при $\omega = 0$ и малых \mathbf{q} , мы получаем

малые \mathbf{q} , $\omega = 0$

$$\text{~~~~~} \equiv -iV_{\text{эфф}}(\mathbf{q}) = -\frac{i4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2}, \quad \lambda - \text{постоянная.} \quad (4.100)$$

Чтобы понять физический смысл соотношения (4.98), сравним его с результатом приближения Хартри — Фока (4.90). Видно, что эти выражения одинаковы с точностью до замены

$$\text{~~~~~} \text{ на } \text{~~~~~} \quad (4.101)$$

Иначе говоря,

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad \text{заменяется на} \quad V_{\text{эфф}}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2}. \quad (4.102)$$

Величина $V_{\text{эфф}}(\mathbf{q})$ называется *эффективной энергией взаимодействия* (в пределе при $\omega = 0$ и малых \mathbf{q} в приближении РРА). Она определяется выражением того же вида, что и матричный элемент (4.83), и, следовательно, должна соответствовать эффективной энергии взаимодействия, имеющей в \mathbf{r} -пространстве вид простого потенциала Юкавы (4.80):

$$V_{\text{эфф}}(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 \frac{e^{-\lambda r}}{r}. \quad (4.103)$$

В противоположность „дальнодействующему“ кулоновскому потенциалу, который убывает с расстоянием как $1/r$, этот потенциал при $r \gg \lambda^{-1}$ убывает экспоненциально и, следовательно, имеет малый радиус действия $\sim \lambda^{-1}$ см. Его называют „экранированным“ потенциалом.

Именно такого экранированного взаимодействия мы и ожидали на основании физических аргументов § 1 гл. 2. Реальный электрон отталкивает от себя другие электроны; в результате положительный фон оголяется, так что за электроном эффективно „следует“ облако положительного заряда шириной λ^{-1} . Это превращает электрон в квазиэлектрон: положительное облако „экранирует“ собственный заряд электрона, существенно уменьшая таким образом его взаимодействие с другими частицами системы на расстояниях, превышающих λ^{-1} .

Поскольку соотношение (4.98) имеет формально тот же вид, что и (4.90), энергию квазичастицы легко вычислить, подставляя в (4.82) величину $V_{\text{эфф}}(\mathbf{k} - \mathbf{l})$ и считая член

с V_{kkl} равным нулю:

$$\epsilon'_k = \frac{k^2}{2m} + \int_{|l| < k_F} \frac{d^3l}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{(k-l)^2 + \lambda^2}. \quad (4.104)$$

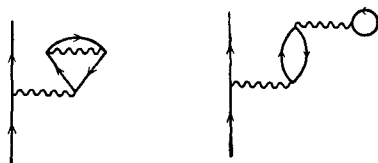
Эффективная масса вычисляется теперь так же, как и для потенциала Юкавы. В простом случае больших λ ($k_F \lambda^{-1} \ll 1$ — условие, которое на самом деле в электронном газе не выполняется) аналогично (4.88) находим эффективную массу

$$m^* = \frac{m}{1 + \frac{16}{3} \frac{m\pi e^2}{\lambda^5} k_F^3}. \quad (4.105)$$

Очевидно, она конечна. Таким образом, учет эффектов корреляции (экранирования), описываемых кольцевыми диаграммами, приводит к физически разумному результату. (Значение m^* в приближении RPA, когда $\omega \neq 0$ и величина q не мала, дано в § 4 гл. 10.)

● Упражнения

1. В системе свободных частиц создается дырка в одночастичном состоянии $\phi_k(\mathbf{r}) = \Omega^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$. Чему равен импульс дырки?
2. Для системы из пяти частиц, показанной на фиг. 6,
 - а) вычислите выражение $c_3^\dagger c_6^\dagger c_4 c_6 c_3 |1111000 \dots\rangle$;
 - б) запишите функцию $|1101100100 \dots\rangle$ в дырочно-частичных обозначениях;
 - в) найдите сумму $\sum_k e_k c_k^\dagger c_k |111100 \dots\rangle$.
3. Пусть мы имеем систему невзаимодействующих частиц, к которой прикладывается внешний возмущающий потенциал, такой, что матричные элементы V_{km} , V_{mk} , V_{kl} , V_{lk} ($m < k_F$, $l > k_F$, $k > k_F$) велики, а все остальные малы. Найдите G^+ ($k_1 = k$, $k_2 = k$, ω)
4. Покажите, что в системе фермионов, взаимодействующих с сохранением импульса, следующие диаграммы не разрешены:



5. Рассмотрите диаграмму 5 в правой части (4.63):
- поставьте обозначения к линиям, используя закон сохранения импульса в явном виде;
 - покажите, что процессы рассеяния при каждом взаимодействии виртуальные.
6. Переведите выражение (4.62а) на язык функций. От каких переменных оно зависит?
7. Покажите, что

The diagram shows an equality between two expressions. On the left is a vertical line with an upward arrow, labeled \mathbf{k}, ω at the bottom. This line is connected to two identical loop diagrams (bubbles) stacked vertically. Each loop consists of two wavy lines forming a closed loop with an arrow pointing clockwise. On the right side of the equation is the product of two diagrams: a vertical line with an upward arrow labeled \mathbf{k}, ω and a single loop diagram (bubble) with two wavy lines and a clockwise arrow, labeled with the number 2.

- 8 Пусть мы имеем гипотетическую систему, в которой наиболее важны процессы рассеяния вперед, процессы обменного рассеяния (4.58), (4.62) и двойного рассеяния (4.62а). Найдите с помощью частичного суммирования приближенное выражение для функции Грина. Не пытайтесь вычислять интегралы!

Глава 5

ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

И ВАКУУМНАЯ АМПЛИТУДА

§ 1. Смысл вакуумной амплитуды

Одна из первых задач теории многих тел, возникающая перед теоретико-полевым диаграммным методом, состоит в вычислении энергии основного состояния E_0 системы взаимодействующих фермионов. Эта величина непосредственно связана с экспериментально измеряемыми характеристиками, например с энергией связи металла или ядерной материи. Теоретический расчет ее — нелегкая работа! Все взаимодействия велики, ухватить их трудно, а наивный подход просто топит вас в пучине бесконечностей. Так, в случае ядра взаимодействие с твердой сердцевиной приводит к „равенству“ $V_{klmn} = \infty$ и делает гамильтониан взаимодействия бесконечным. Задача об электронном газе не лучше: бесконечности возникают здесь во всех порядках теории возмущений, начиная со второго.

Диаграммные методы, рассматриваемые в этой главе, дают нам изящный способ обращения с такими неприятными объектами, как ядерное и электронное взаимодействия. В обоих случаях удастся произвести частичное суммирование бесконечных рядов бесконечно больших членов и получить конечный результат! Для этого надо уметь в общем виде записывать член n -го порядка обычного ряда теории возмущений для E_0 , т. е. ряда

$$E_0 = W_0 + \langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_0 \rangle + \sum_{m \neq 0} \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | H_1 | \Phi_0 \rangle}{W_0 - W_m} + \dots, \quad (5.1)$$

где W_0 , W_m — энергии основного и возбужденных состояний невозмущенного гамильтониана, а Φ_0 и Φ_m — соответствующие волновые функции. Пользуясь стандартной стационарной теорией возмущений, выражение для общего члена ряда получить трудно. Существует, однако, нестационарная техника, которая дает наглядный рецепт записи искомого

члена n -го порядка, — это метод разложения вакуумной амплитуды.

Вакуумная амплитуда $R(t)$ определяется следующим образом. Пусть Φ_0 есть волновая функция основного состояния невозмущенной системы, определяемая равенством (4.12) (т. е. Φ_0 есть „ферми-вакуум“). Тогда $R(t)$ — амплитуда вероятности того, что если в момент $t=0$ система находилась в состоянии Φ_0 и было включено внешнее поле и (или) взаимодействие между частицами, то в момент t система опять будет в состоянии Φ_0 . Иначе говоря, $R(t)$ есть амплитуда перехода „ферми-вакуум“ — „ферми-вакуум“.

Следует отметить, что вакуумная амплитуда и функция Грина — совершенно разные вещи. Функция Грина описывает динамику одной частицы в одночастичном состоянии ϕ_k под влиянием взаимодействия с другими частицами, а вакуумная амплитуда имеет дело с динамикой всей системы частиц в многочастичном состоянии Φ_0 под влиянием внутренних взаимодействий.

Определим вакуумную амплитуду более детально. Пусть при $t=0$ система находится в состоянии, описываемом функцией Φ_0 . Если нет никаких взаимодействий, то в момент t волновая функция будет иметь вид $\Phi_0 e^{-iW_0 t}$, где W_0 — энергия основного состояния. Если теперь при $t=0$ включается взаимодействие, то система начинает совершать переходы из Φ_0 во все возможные N -частичные состояния. Мы ищем амплитуду вероятности $R(t)$ того, что по прошествии времени t система попадет в (претерпевшее временную эволюцию) основное состояние с волновой функцией $\Phi_0 e^{-iW_0 t}$. Пусть состояние системы через время t будет $\Psi(t)$. Оно должно получаться из основного состояния Φ_0 с помощью некоторой операции

$$\Psi(t) = U(t) \Phi_0, \quad (5.2)$$

которую можно рассматривать как определение „оператора эволюции во времени“ $U(t)$ (см. приложение II). Амплитуда вероятности $R(t)$ есть просто скалярное произведение величин $\Phi_0 e^{-iW_0 t}$ и $\Psi(t)$

$$\begin{aligned} R(t) &= (\Phi_0 e^{-iW_0 t}, \Psi(t)) = \int \Phi_0^* e^{iW_0 t} U(t) \Phi_0 dr_1 \dots dr_N \equiv \\ &\equiv \langle \Phi_0 | U(t) | \Phi_0 \rangle e^{iW_0 t} = \text{Вакуумная амплитуда.} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Вакуумная амплитуда играет важную роль в теории; дело в том, что, зная ее, мы можем вычислить энергию E_0 основного состояния с помощью теоремы

$$E_0 = W_0 + \lim_{t \rightarrow \infty} i \frac{d}{dt} \ln R(t), \quad (5.4)$$

где η — бесконечно малая величина. (Доказательство см. в приложении III.) Таким образом, если мы можем найти диаграммное разложение для $R(t)$, то диаграммный ряд для E_0 получается по формуле (5.4).

Диаграммное разложение $R(t)$ в ряд теории возмущений несколько сходно с соответствующим разложением для функции Грина. Однако оно значительно сложнее, так как, кроме диаграмм, состоящих только из одной части („связанные диаграммы“), в него входят и диаграммы, построенные из двух и более частей („несвязанные диаграммы“). К счастью, оказывается, что логарифм R в соотношении (5.4) как раз равен сумме только связанных диаграмм. Это знаменитая *теорема о связанных группах*. Пользуясь ею в соотношении (5.4), мы получаем обычный ряд теории возмущений Рэлея — Шредингера, равно как и общее правило записи члена n -го порядка.

В этой главе мы рассмотрим сначала аналог вакуумной амплитуды в случае классического детского бильярда. Далее мы покажем, как можно рассчитать с помощью диаграмм вакуумную амплитуду и энергию основного состояния одной квантовой частицы в возмущающем внешнем поле. Наконец, метод будет обобщен на системы многих частиц. Его приложения к электронному газу и к ядерной материи даны в гл. 12. Желающие могут перейти к ним сразу после этой главы.

§ 2. Вакуумная амплитуда детского бильярда

Детский бильярд на фиг. 5, который мы использовали для иллюстрации расчета одночастичной функции Грина, может также служить классическим аналогом при описании вакуумной амплитуды. Перед тем как выстреливают частицу, она находится в „основном состоянии“ или в „вакууме“ в точке O . Ускоряющий механизм выталкивает частицу через коллиматор, после чего она испытывает ряд взаимодействий с различными рассеивающими центрами, влетая, в конце концов, в одну из точек r_2, r_3, \dots, r_6 или, может быть, в исходную точку O . (В дальнейшем положение точки O будет обозначаться через r_0 . Векторы r_1, r_2 будут служить переменными, указывающими начальную и конечную координаты частицы, т. е. теперь они уже не фиксированы, как показано на фиг. 5.)

В данном случае роль классического аналога вакуумной амплитуды играет вероятность $P(r_2 = r_0, t_2 = t; r_1 = r_0, t_1 = 0)$

того, что если в момент $t_1 = 0$ пробная частица находилась в своем „основном состоянии“ в точке $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0$, то в момент времени $t_2 = t$ она вернется туда же — в „основное состояние“ в точку $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_0$. Чтобы сделать задачу попроще, опустим сначала время в аргументе и рассмотрим просто величину $P(\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0)$, или, короче, $P(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$; это есть вероятность того, что частица вылетает из точки $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0$ и независимо от времени возвращается в $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_0$. Величину $P(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$ можно разбить на сумму вероятностей различных траекторий, по которым частица может двигаться по полю бильярда и все же возвращаться в точку O . Первая возможность состоит в том, что частица вовсе не выталкивается, продолжая лежать в точке O . Следующая возможность: пружинка срабатывает, но недостаточно сильно, чтобы вытолкнуть частицу из коллиматора, так что она опять падает в точку O . Далее, частица может вылететь из коллиматора, отскочить от хвоста жирафа снова в коллиматор и скатиться в O и т. д. Пусть P_u — вероятность того, что пружинка не срабатывает, $P_0(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$ — вероятность того, что частица выходит из точки \mathbf{r}_i и путешествует до \mathbf{r}_j , не рассеиваясь ни на одном из животных, а $P(A)$ — „член взаимодействия“, равный вероятности того, что если частица подлетает к животному A , то она рассеивается на нем. Далее, предполагая вероятности независимыми, мы получаем, как и в случае функций Грина,

$$P(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) = P_u + P(O)P_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) + P(O)P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_0)P(G)P_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) + \\ + P(O)P_0(\mathbf{r}_L, \mathbf{r}_0)P(L)P_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) + \dots + \\ + P(O)P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_0)P(G)P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_0)P(G)P_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) + \dots \quad (5.5)$$

[Заметим, что величина $P(O)$ есть вероятность рассеяния с уходом частицы из точки O ; она равна как раз $1 - P_u$, т. е. вероятности того, что пружинка срабатывает.] Воспользовавшись табл. 1, запишем ряд (5.5) с помощью диаграмм

$$P(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) = P_u + \\ + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots + \text{diagram 4} + \dots + \text{diagram 5} + \dots \quad (5.6)$$

Здесь символ \textcircled{O} обозначает рассеяние в точке O . Этот ряд можно вычислить с помощью частичного суммирования

аналогично тому, как делалось в выражениях (2.17) – (2.19), но мы не станем себя этим утруждать.

В более общем случае с учетом времени диаграммный ряд, как следует из табл. 2, принимает вид (здесь мы нарушили условие, что время возрастает в положительном направлении оси $y!$)

$$P(\mathbf{r}_O, \mathbf{r}_O, t) = P_u + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots + \text{diagram 3} + \dots; \quad (5.7)$$

это эквивалентно соотношению

$$P(\mathbf{r}_O, \mathbf{r}_O, t) = P_u + P_0(\mathbf{r}_O, \mathbf{r}_O, t) P(O) + \int_0^t dt_G P_0(\mathbf{r}_G, \mathbf{r}_O, t_G - 0) P(G) P_0(\mathbf{r}_O, \mathbf{r}_G, t - t_G) P(O) + \dots \quad (5.8)$$

Простая модификация модели со временем позволяет получить более точный аналог квантовой вакуумной амплитуды. Эта модификация состоит в том, что пружинка может срабатывать произвольное число раз в течение интервала времени $(0, t)$ (а не нуль или один раз при $t = 0$, как раньше). Тогда, если частица вернулась в точку O до момента времени t , появляется вероятность того, что она снова будет выстрелена и снова вернется назад, пока время t не истекло. Если интервал t достаточно велик, то такие процессы могут повторяться много раз, и их можно изобразить диаграммами следующего вида:

$$\dots \quad (5.9)$$

Это так называемые *несвязанные* диаграммы. С учетом их ряд для $P(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, t)$ принимает вид

$$P(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, t) = P_u +$$

$$+ \dots \quad (5.10)$$

Перейдем теперь к квантовомеханическому случаю.

§ 3. Квантовая вакуумная амплитуда для системы, состоящей из одной частицы

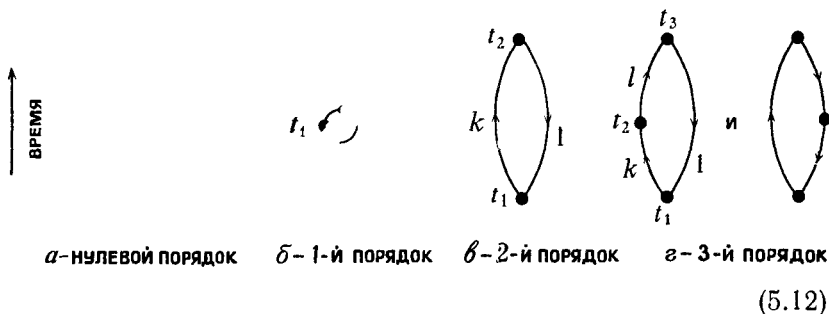
Расчет квантовой вакуумной амплитуды аналогичен только что рассмотренной классической задаче. Рассмотрим сначала простейшую ситуацию: пусть ферми-система состоит из одной частицы во внешнем поле и имеет невырожденные энергетические уровни. Примером может служить электрон в поле одномерного гармонического осциллятора. Пусть невозмущенный гамильтониан есть

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + U(r); \quad (5.11)$$

его собственные функции и собственные значения обозначим через $\phi_k(\mathbf{r})$ и ϵ_k . Будем нумеровать одночастичные волновые функции и энергии в порядке возрастания последней: $\phi_1, \phi_2, \dots, \epsilon_1, \epsilon_2, \dots$. Основной уровень соответствует частице с волновой функцией ϕ_1 ; при этом все другие более высокие состояния не заняты; в формализме чисел заполнения это означает, что $\Phi_0 = |1_1, 0_2, 0_3, \dots\rangle$. Соответствующая энергия основного состояния W_0 равна, очевидно, как раз ϵ_1 . Энергия

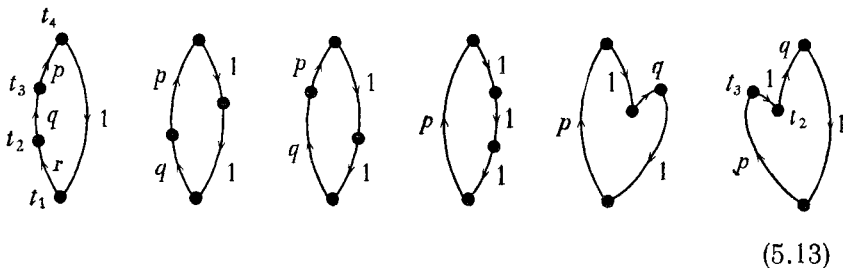
Ферми тоже равна ϵ_1 . Типичное возбужденное состояние такой системы — одна частица в состоянии с волновой функцией ϕ_k и ни одной частицы в других состояниях: $\Phi_{\text{возб}} = |0_1, 0_2, \dots, 1_k, \dots\rangle$. В дырочно-частичных обозначениях волновая функция основного состояния есть $\Phi_0 = |0\rangle$, а в типичном возбужденном состоянии мы имеем дырку с волновой функцией ϕ_1 и *частицу* с волновой функцией ϕ_k : $\Phi_{\text{возб}} = |1_1^h, 1_k^p\rangle$. Отметим, что в рассматриваемой одночастичной системе существует лишь одно возможное состояние дырки, например ϕ_1 .

Пусть теперь к гамильтониану H_0 добавлено возмущение $V(\mathbf{r})$. Вакуумная амплитуда есть амплитуда вероятности того, что если при $t=0$ система находится в основном состоянии Φ_0 и на нее действуют нуль или более раз потенциалом $V(\mathbf{r})$, то в момент времени t она будет находиться в состоянии $\Phi_0 e^{-iW_0 t}$. Аналогично случаю детского бильярда величина $R(t)$ опять равна сумме амплитуд вероятностей всех различных путей, по которым система может, выйдя из состояния Φ_0 и взаимодействуя с потенциалом $V(\mathbf{r})$ нуль, один или более раз, вновь вернуться в состояние Φ_0 . Как видно из диаграммы *a* из (5.12), в нулевом порядке вообще ничего не происходит:



В первом порядке в момент t_1 потенциал $V(\mathbf{r})$ может поднять частицу из состояния ϕ_1 , создав таким образом дырку, и немедленно вернуть частицу назад, уничтожив дырку. Это показано на диаграмме *б* из (5.12) [ср. с диаграммой (4.54)!]. Во втором порядке [диаграмма *в* из (5.12)] потенциал $V(\mathbf{r})$ может забросить частицу в момент времени t_1 в состояние с волновой функцией ϕ_k , создав таким образом одновременно дырку и *частицу* в ϕ_k , а в момент t_2 рассеять *частицу* назад в ϕ_1 , разрушив дырку и *частицу*, и т. д. Процессы третьего порядка показаны на диаграм-

мах g из (5.12); в четвертом порядке возможны следующие процессы:



(5.13)

[Обратите внимание, что на двух последних диаграммах (5.13) имеются по две линии частиц и по две линии дырок между моментами времени t_2 и t_3 , хотя наша одночастичная система может содержать не больше одной частицы и одной дырки. Легко показать, однако, что эти диаграммы в точности компенсируются несвязанными диаграммами типа диаграмм (5.17). Например, множитель (-1) , возникающий из-за дополнительной фермионной петли, приводит к компенсации последней диаграммы в (5.13) диаграммой четвертого порядка в (5.17). В сказанном легко убедиться, расписав диаграммы в соответствии с табл. 6. Тем не менее такие диаграммы необходимо учитывать, хотя в них и нарушается принцип сохранения числа частиц. Это нужно для доказательства теоремы о связанных группах, изложенной в следующем параграфе. То же относится и к диаграммам, в которых нарушается принцип Паули.]

Процессы (5.12) и (5.13) удобно описывать в дырочно-частичном формализме, пользуясь гамильтонианом H_1 из (4.26). Так, в первом порядке

$$H_1 \text{ действует в момент } t_1 \quad V_{11} b_1 b_1^\dagger |0\rangle = V_{11} |0\rangle. \quad (5.14)$$

Во втором порядке оператор H_1 действует в момент t_1 , создавая из ферми-вакуума *частица — дырка*

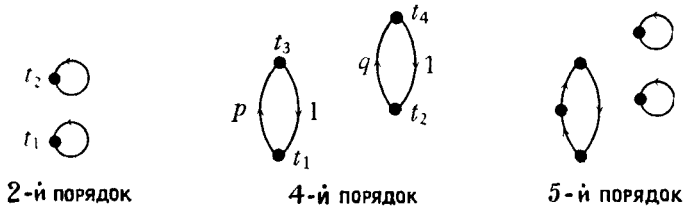
$$V_{k1} a_k^\dagger b_1^\dagger |0\rangle = V_{k1} |1_k^p 1_1^h\rangle \quad (5.15)$$

В момент t_2 оператор H_1 действует снова, уничтожая пару и возвращая систему в состояние вакуума:

$$V_{1k} b_1 a_k V_{k1} |1_k^p, 1_1^h\rangle = V_{1k} V_{k1} |0\rangle. \quad (5.16)$$

Диаграммы (5.12) и (5.13) часто называют диаграммами *поляризации вакуума*, так как они изображают все виртуальные процессы, происходящие в ферми-вакууме в результате действия возмущающего потенциала [см. абзац после соотношения (4.47)].

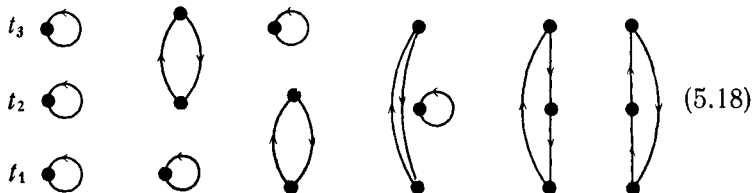
Помимо процессов (5.12) и (5.13), надо учитывать и процессы более высокого порядка, состоящие из нескольких законченных процессов низшего порядка, например



(5.17)

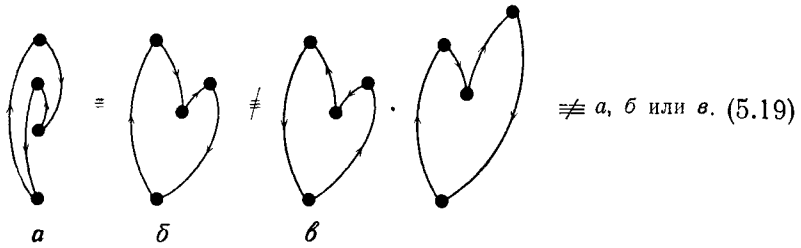
Эти разъединенные, или „несвязанные“, диаграммы аналогичны классическим диаграммам (5.9).

Чтобы изобразить все диаграммы n -го порядка, нарисуем вертикально n точек, обозначив их буквами t_1, t_2, \dots, t_n , и соединим их всеми возможными „топологически различными“ (см. ниже) способами так, чтобы в каждую точку входила и из каждой точки выходила одна линия. Например, в третьем порядке мы получаем следующие шесть диаграмм:



Две диаграммы *топологически эквивалентны*, если одну из них можно получить из другой путем деформации без изменения порядка точек по вертикали; в противном случае диаграммы различны. Проиллюстрируем это на примере диа-

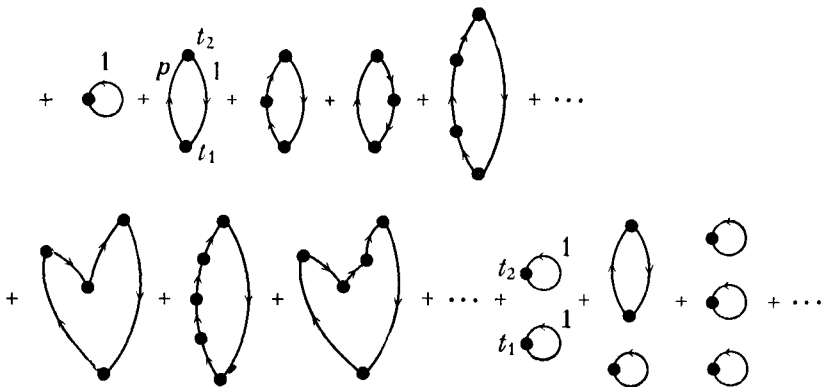
грамм четвертого порядка:



(Направления стрелок на диаграммах очень важны! Возможные деформации легко представить себе, вообразив, что вместо точек и линий мы имеем пуговицы, соединенные резиновыми шнурками с прикрепленными к ним головками стрелок. Такие диаграммы можно деформировать во всех трех пространственных измерениях.)

В конце концов, как и в случае детского бильярда, диаграммное разложение для вакуумной амплитуды оказывается в точности равным сумме всех диаграмм типа приведенных выше:

$$R = 1 +$$



$$(5.20)$$

Здесь символ 1 означает, что в невозмущенном случае амплитуда вероятности найти систему в основном состоянии равна 1. Это есть аналог величины P_u в классическом случае. Сравним ряд (5.20) с соответствующим классическим

выражением (5.10). С помощью табл. 6 можно перевести эти диаграммы на язык функций

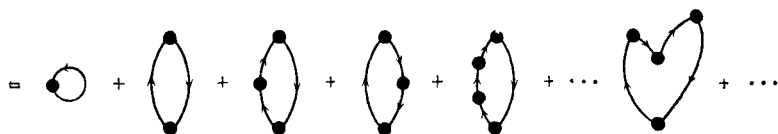
$$\begin{aligned}
 R(t) = & 1 + V_{11} \int_0^t dt_1 G_0^-(1, t_1 - t_1) + \\
 & + \sum_{p>1} V_{1p} V_{p1} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 G_0^+(p, t_2 - t_1) G_0^-(1, t_1 - t_2) + \dots \\
 & + V_{11} V_{11} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 G_0^-(1, t_1 - t_1) G_0^-(1, t_2 - t_2) + \dots \quad (5.21)
 \end{aligned}$$

Мы просуммировали здесь по всем индексам состояний и проинтегрировали по всем промежуточным временам от 0 до t , так как каждая диаграмма фактически изображает бесконечно большое число диаграмм с различными индексами состояний и с различными временами t_1 , t_2 и т. д.

§ 4. Теорема о связанных группах для системы, состоящей из одной частицы

Рассмотрев внимательно многоголовое чудовище (5.20), мы обнаружили два типа голов: связанные диаграммы, каждая из которых представляет собой одно единое целое, и „несвязанные“, состоящие из двух или более отдельных, но внутренне связанных частей. Обсудим теперь знаменитую теорему, которая позволит нам совершить подвиг Геракла — отрубить все несвязанные головы. Это так называемая теорема „о связанных группах“. Она гласит, что

$$\ln R(t) = \sum \text{всех связанных диаграмм} =$$



(5.22)

Доказательство основывается на том факте, что, грубо говоря, вклад от несвязанной диаграммы пропорционален произведению вкладов от различных ее частей. Рассмотрим,

например, член в выражении (5.21), пропорциональный $V_{11}V_{11}$:

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{c} t_2 \\ \circ \\ \circ \\ t_1 \end{array} &\equiv V_{11}V_{11} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 G_0^- G_0^- = V_{11}^2 G_0^{-2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 = \\
 &= V_{11}^2 G_0^{-2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \times \frac{1}{2} = \quad (\text{где } t_2 > \text{ или } < t_1) \\
 &= \frac{1}{2} \left[V_{11} \int_0^t dt_1 G_0^-(1, t_1 - t_1) \right] \times \left[V_{11} \int_0^t dt_2 G_0^-(1, t_2 - t_2) \right] = \\
 &= \frac{1}{2} \times \begin{array}{c} \circ \\ \bullet \\ \circ \end{array} \times \begin{array}{c} \circ \\ \bullet \\ \circ \end{array} = \\
 &= \frac{1}{2!} \times \begin{array}{c} \circ \\ \bullet \\ \circ \end{array}^2 \quad (5.23)
 \end{aligned}$$

(мы воспользовались здесь тем фактом, что в рассматриваемом случае функция G_0^- не зависит от времени). В общем случае оказывается, что вклад несвязанной диаграммы из n одинаковых частей L в точности равен $(1/n!) \times L^n$.

Подобная факторизация имеет место и для неидентичных частей, если сначала просуммировать по всем возможным последовательностям времен, которым они соответствуют. Например, три диаграммы в формуле (5.18) можно просуммировать следующим образом (для краткости мы опускаем множитель i):

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{c} t_c \\ \bullet \\ \circ \\ \bullet \\ t_b \\ \circ \\ t_a \end{array} &+ \begin{array}{c} t_c \\ \bullet \\ \circ \\ \bullet \\ t_b \\ \circ \\ t_a \end{array} + \begin{array}{c} t_c \\ \bullet \\ \circ \\ \bullet \\ t_b \\ \circ \\ t_a \end{array} = \\
 &= \sum_k V_{k1} V_{1k} V_{11} \int \int \int dt_a dt_b dt_c \times \\
 &\times G_0^+(k, t_c - t_b) G_0^-(1, t_b - t_c) G_0^-(1, t_a - t_b) \times \\
 &\times [\theta_{t_c - t_b} \theta_{t_b - t_a} + \theta_{t_c - t_a} \theta_{t_a - t_b} + \theta_{t_a - t_c} \theta_{t_c - t_b}] = \begin{array}{c} \circ \\ \bullet \\ \circ \end{array} \times \begin{array}{c} \circ \\ \bullet \\ \circ \end{array} \quad (5.24)
 \end{aligned}$$

где

$$\theta_x = \begin{cases} 1 & \text{если } x > 0, \\ 0 & \text{если } x < 0. \end{cases} \quad (5.25)$$

Функции θ позволяют удобно записать последовательность времен во всех трех диаграммах. Посмотрев внимательно, можно увидеть, что при $t_c > t_b$ член в квадратных скобках равен 1, независимо от значения t_a . Это означает, что интеграл по t_a не зависит от интегралов по t_b и t_c , поэтому тройной интеграл разбивается на произведение двух частей, как показано выше.

Комбинируя эти результаты, мы находим, что амплитуду R можно записать в виде

$$\begin{aligned} R &= 1 + \\ &+ \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right] + \frac{1}{2!} \left[\text{diagram 1}^2 + 2 \times \text{diagram 1} \times \text{diagram 2} + \dots \right] + \\ &+ \frac{1}{3!} \left[\text{diagram 1}^3 + 3 \times \text{diagram 1}^2 \times \text{diagram 2} + \dots \right] + \dots = \\ &= 1 + \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right] + \frac{1}{2!} \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right]^2 + \\ &+ \frac{1}{3!} \left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right]^3 + \dots = \\ &= e^{\left[\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right]} = e^{\sum \text{по всем связанным диаграммам}} \end{aligned} \quad (5.26)$$

Отсюда немедленно следует соотношение (5.22), и теорема о связанных группах доказана.

§ 5. Вычисление энергии основного состояния для системы, состоящей из одной частицы

Важность только что полученного результата состоит в том, что энергию основного состояния, зависящую в соответствии с соотношением (5.4) лишь от логарифма R ,

$$E_0 = \varepsilon_1 + \lim_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)} i \frac{d}{dt} \ln R(t), \quad (5.27)$$

мы можем записать в виде суммы только по связанным диаграммам

$$E_0 = \varepsilon_1 +$$

$$+ \lim_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)} i \frac{d}{dt} \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1: circle with dot} \\ \text{Diagram 2: loop with two dots, p on left, 1 on right} \\ \text{Diagram 3: loop with three dots, p on left, q on bottom, 1 on right} \\ \text{Diagram 4: loop with four dots, p on left, 1 on right} \\ \text{Diagram 5: loop with five dots, 1 on right} \\ \text{Diagram 6: loop with six dots, 1 on right} \\ \dots \end{array} \right] \quad (5.28)$$

В многочастичном случае важность теоремы о связанных группах определяется более глубокой причиной, а именно: если бы мы не воспользовались этой теоремой, мы обнаружили бы, что ряд теории возмущений для энергии сильно расходится — пропорционально числу частиц при $N \rightarrow \infty$; см. [9].

Теперь можно получить выражение для энергии основного состояния, переведя диаграммный ряд на язык формул с помощью табл. 6. При этом равенство (5.28) принимает вид

$$E_0 = \varepsilon_1 + \lim_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)} i \frac{d}{dt} \left\{ (-i) V_{11} \int_0^t dt_1 i G_0^-(1, t_1 - t_1) + \sum_{p \neq 1} (-i)^2 V_{1p} V_{p1} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 i G_0^+(p, t_2 - t_1) i G_0^-(1, t_1 - t_2) + \dots \right\}. \quad (5.29)$$

Этот ряд можно вычислить, если подставить сюда функции G из табл. 6, помня, что „фермионной петле“ соответствует множитель (-1) . Так,

$$\begin{aligned} \text{Diagram 1} &= (-1)(-i) V_{11} \int_0^t dt_1 (-1) = -i V_{11} t, \\ E_0^{(1)} &= \lim_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)} i \frac{d}{dt} \text{Diagram 1} = V_{11}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Второй член дает

$$\begin{aligned} \text{Diagram} &= (-1)^2 (-i)^2 \sum_{p \neq 1} V_{1p} V_{p1} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \theta_{t_2 - t_1} e^{-i(\varepsilon_p - \varepsilon_1)(t_2 - t_1)} = \\ &= (-1)^2 (-i)^2 \sum_{p \neq 1} V_{1p} V_{p1} \int_0^t dt_1 \int_0^{t-t_1} d(t_2 - t_1) e^{-i(\varepsilon_p - \varepsilon_1)(t_2 - t_1)}. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Интегрируя, беря производную и переходя к пределу, получаем для $E_0^{(2)}$

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)} i \frac{d}{dt} \text{Diagram} &= \\ &= -i \sum_{p \neq 1} V_{1p} V_{p1} \left[-\frac{e^{-i(\varepsilon_p - \varepsilon_1)\infty(1-i\eta)}}{i(\varepsilon_p - \varepsilon_1)} + \frac{1}{i(\varepsilon_p - \varepsilon_1)} \right], \end{aligned}$$

или

$$E_0^{(2)} = \sum_{p \neq 1} \frac{V_{1p} V_{p1}}{\varepsilon_1 - \varepsilon_p}. \quad (5.32)$$

При этом осциллирующая экспонента изводится, так как величины $(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)$ и бесконечно малая η положительны. (Заметим, что величина η выбрана таким образом, что $\eta \times \infty = \infty$.) Продолжая в том же духе, находим члены третьего и четвертого порядков:

$$E_0^{(3)} = \sum_{p, q \neq 1} \frac{V_{1p} V_{pq} V_{q1}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)(\varepsilon_1 - \varepsilon_q)} - \sum_{p \neq 1} \frac{V_{1p} V_{p1} V_{11}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)^2}, \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} E_0^{(4)} &= \sum_{p, q, r \neq 1} \frac{V_{1p} V_{pq} V_{qr} V_{r1}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)(\varepsilon_1 - \varepsilon_q)(\varepsilon_1 - \varepsilon_r)} - \sum_{p, q \neq 1} \frac{V_{1p} V_{pq} V_{q1} V_{11}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_q)} - \\ &- \sum_{p, q \neq 1} \frac{V_{1p} V_{pq} V_{q1} V_{11}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)(\varepsilon_1 - \varepsilon_q)^2} + \sum_{p \neq 1} \frac{V_{1p} V_{p1} V_{11} V_{11}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)^3} - \\ &- \sum_{p, q \neq 1} \frac{V_{1p} V_{p1} V_{1q} V_{q1}}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_p)^2 (\varepsilon_1 - \varepsilon_q)}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Мы получили не что иное, как хорошо известный ряд теории возмущений Рэлея — Шредингера до четвертого порядка!

Если бы этот результат из обычного учебника мы рассматривали как конечный продукт тщательно разработанной теории вакуумной амплитуды, то можно было бы справедливо заключить, что боевая ракета была построена лишь для того, чтобы подбить маленького воробушка. Однако наша цель не в том, чтобы вновь строить теорию возмущений, которую можно найти в любом учебнике и которой по причине конечности человеческой жизни никто никогда не воспользуется, если надо брать члены дальше, скажем, 27-порядка. Мы хотели бы создать более экзотическую теорию и использовать ее до бесконечного порядка. Диаграммы как раз и позволяют это сделать, давая систематический способ записи члена n -го порядка в разложении для E_0 .

Чтобы понять, в чем он состоит, рассмотрим сначала члены третьего порядка (5.33) и сравним их с соответствующими диаграммами в ряду (5.28). Произведение множителей V_{q1} , V_{pq} и V_{1p} , соответствующих вершинам на первой диаграмме третьего порядка, как раз равно числителю первого члена $E_0^{(3)}$ (с точностью до множителя $-i$, связанного с правилами вычисления вакуумной амплитуды). Так же обстоит дело и со второй диаграммой третьего порядка. Легко показать, что отсюда следует общее правило: числители членов n -го порядка в разложении E_0 в ряд теории возмущений получаются из соответствующих диаграмм для вакуумной амплитуды путем сопоставления каждой вершине множителя V_{ij} . Чтобы найти знаменатели, проведем тонкие горизонтальные пунктирные линии между двумя последовательными (во времени) вершинами и каждой такой линии сопоставим множитель

$$\frac{1}{\sum \varepsilon_i} - \frac{1}{\sum \varepsilon_p} \quad (5.35)$$

По всем линиям дырок, пересекаемым горизонтальной пунктирной линией *По всем линиям частиц, пересекаемым горизонтальной пунктирной линией*

Например,

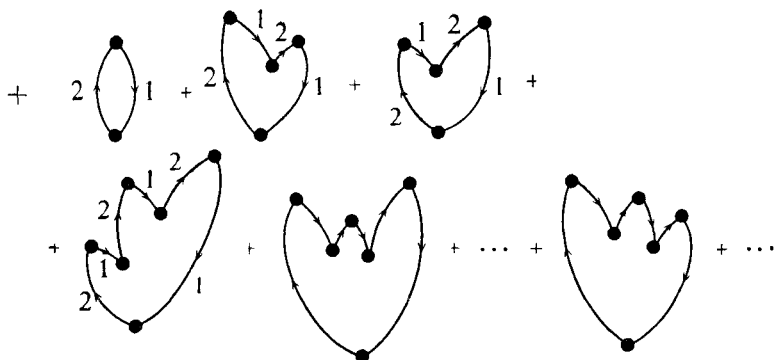
$$\begin{array}{cc} \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} & \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_p}, & \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} & \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_p}, \\ \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} & \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_q}, & \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \cdots \\ \vdots \\ \cdots \end{array} & \frac{1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_p}. \end{array} \quad (5.36)$$

Далее умножим результат на $(-1)^{h+1}$, где h есть число дырочных линий на диаграмме — это даст нам правильный

знак. И, наконец, просуммируем по всем индексам частиц. Эти правила (которые можно строго доказать, исходя из разложения вакуумной амплитуды) приводят к правильным результатам для обоих членов третьего порядка; читатель может легко проверить, что так же обстоит дело и во всех порядках. [Последний член в выражении (5.34) для четвертого порядка получен суммированием обеих „рукавиц“ в (5.13).]

Теперь мы уже можем понять, каким образом приближенно вычисляется ряд теории возмущений, даже если возмущение H_1 велико и надо суммировать диаграммы определенного типа вплоть до бесконечного порядка. Пусть возмущающий потенциал столь велик, что с помощью обычного метода, т. е. обрывая ряд на нескольких первых членах, приличный результат получить невозможно. Но предположим, например, что большими оказываются только матричные элементы потенциала между основным состоянием 1 и первым возбужденным состоянием 2, т. е. заметны лишь элементы V_{12} и V_{21} , а все остальные V_{11} , V_{13} , V_{31} , V_{33} , ... малы. Тогда ряд теории возмущений можно аппроксимировать частичной суммой только по тем особым диаграммам, в которых все вершины соединяются линиями „1“ и „2“. Это значит, что энергия E_0 сводится к сумме следующих диаграмм:

$$E_0 \approx \varepsilon_1 +$$



(5.37)

Диаграммы нечетного порядка вообще не появляются. Из 16 диаграмм шестого порядка мы изобразили только 3 типичные. Пользуясь уже известными правилами и замечая, что

$V_{12} = V_{21}^*$, мы получаем

$$\begin{aligned}
 E_0 \approx \varepsilon_1 + \frac{|V_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} - \frac{|V_{12}|^4}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \times 2 + \\
 + \frac{|V_{12}|^6}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \times 4 + \\
 + \frac{|V_{12}|^8}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times 3(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \times (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \times 12 + \dots = \\
 = \varepsilon_1 + \frac{|V_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} - \frac{|V_{12}|^4}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^3} + \frac{2|V_{12}|^6}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^5} + \dots \quad (5.38)
 \end{aligned}$$

Это выражение можно привести к более знакомому виду, если добавить и вычесть слагаемое $\varepsilon_1/2$, а также вынести за скобки множитель $1/2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$:

$$E_0 = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2} \left[1 + \frac{2|V_{12}|^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} - \frac{2|V_{12}|^4}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^4} + \frac{4|V_{12}|^6}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^6} + \dots \right]. \quad (5.39)$$

Ряд, заключенный в скобки, представляет собой как раз разложение квадратного корня. Таким образом, окончательно мы имеем

$$E_0 \approx \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2} \sqrt{1 + \frac{4|V_{12}|^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2}}. \quad (5.40)$$

Итак, мы нашли энергию основного состояния в случае сильного возмущающего взаимодействия. Для этого пришлось произвести частичное суммирование ряда теории возмущений с учетом членов всех порядков.

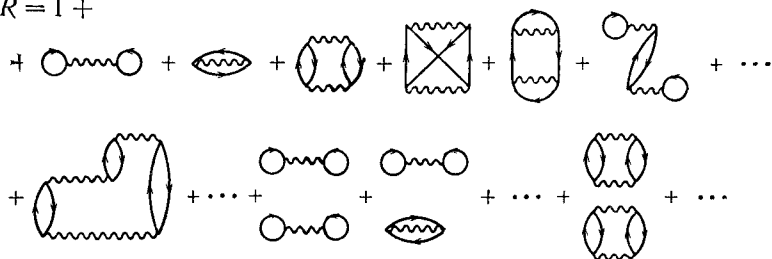
В данном случае полученный результат не столь замечателен, как могло бы показаться на первый взгляд. Его можно было бы получить и гораздо проще, непосредственно диагонализуя гамильтониан по уровням 1 и 2 [см. (7.64)]. Этот одночастичный пример, как и другие уже рассмотренные нами, очевидно, слишком прост, чтобы продемонстрировать на нем мощь диаграммной техники; его следует рассматривать лишь как ясную иллюстрацию общего метода.

§ 6. Система многих тел

Метод, с помощью которого мы рассмотрели задачу об одной частице, можно обобщить и на случай системы многих частиц (без внешнего потенциала). Воспользуемся для этого диаграммами взаимодействия (4.43) и (4.44). Тогда вакуумную амплитуду можно представить в виде суммы всех возможных последовательностей взаимодействий, которые

начинаются и оканчиваются в основном состоянии („вакууме“) системы многих тел:

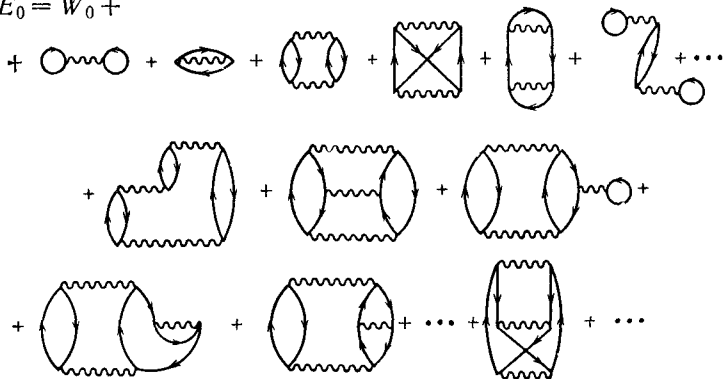
$$R = 1 +$$



(5.41)

Энергия основного состояния снова дается суммой только связанных диаграмм; ее можно записать в виде

$$E_0 = W_0 +$$



(5.42)

Диаграммы (5.42) расшифровываются с помощью совершенно таких же правил, что и в одночастичном случае. Формулировку их мы отложим до гл. 12; здесь же ограничимся только кратким упоминанием нескольких распространенных аппроксимаций для энергии основного состояния, E_0 , которые можно получить из ряда (5.42).

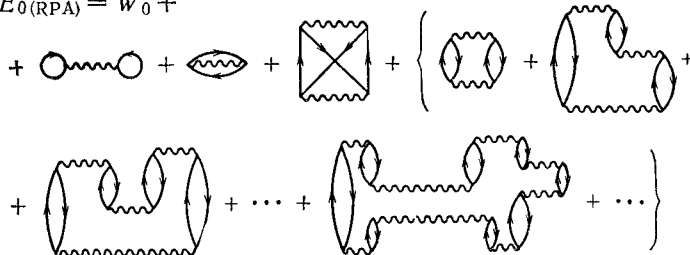
Простейшее приближение — это приближение Хартри—Фока (HF). Оно сводится к тому, что от ряда остается только сумма двойного пузыря и устрицы:

$$E_{0(\text{HF})} = W_0 + \overset{k}{\circ} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \overset{l}{\circ} + \underset{l}{\text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---}} \quad (5.43)$$

Чтобы расшифровать эти диаграммы, надо знать лишь три простых правила. Мы их сейчас приведем: 1) каждой линии взаимодействия соответствует множитель V_{klmn} ; 2) каждой дырочной линии и каждой фермионной петле сопоставляется множитель (-1) ; 3) все выражения умножаются на $1/2$, так как диаграммы симметричны. Помня, что все линии здесь дырочные, находим

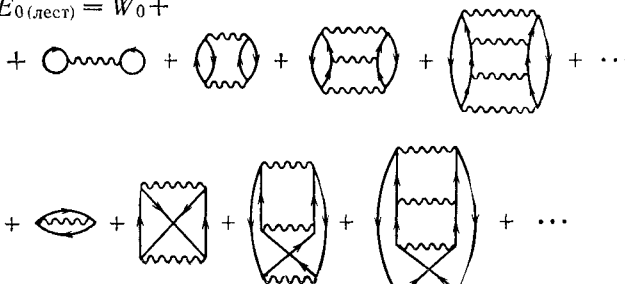
$$E_{0(\text{HF})} = \sum_{k < k_F} \epsilon_k + \frac{1}{2} \sum_{k, l < k_F} V_{klkl} - \frac{1}{2} \sum_{k, l < k_F} V_{lkkk}. \quad (5.44)$$

Приближение, справедливое в случае электронного газа высокой плотности (приближение случайных фаз, или RPA), эквивалентно частичному суммированию всех „кольцевых“ диаграмм во втором и более высоких порядках

$$E_{0(\text{RPA})} = W_0 +$$


$$+ \dots + \dots \quad (5.45)$$

Для ядерной материи мы имеем „лестничное приближение“, в котором учитывается частичная сумма всех лестниц:

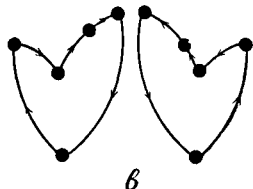
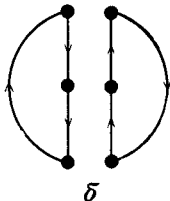
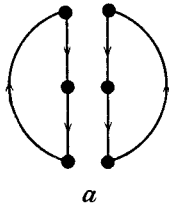
$$E_{0(\text{лест})} = W_0 +$$


$$+ \dots \quad (5.46)$$

Читатель, желающий теперь ознакомиться с вычислением энергии основного состояния электронного газа по Гелл-Манну — Бракнеру и с теорией ядерной материи Бракнера, может переходить прямо к гл. 12.

● Упражнения

1. Переведите на язык функций последнюю из диаграмм (5.13).
2. Являются ли диаграммы в приведенных ниже парах топологически эквивалентными или различными?



3. Пусть мы имеем систему из N (N велико) невзаимодействующих фермионов во внешнем поле $U(\mathbf{r})$. К гамильтониану добавляется возмущение $V(\mathbf{r})$. Изобразите все диаграммы вплоть до четвертого порядка в разложении вакуумной амплитуды.

4. Примените правила, которые приведены в абзаце, содержащем соотношения (5.35) и (5.36), к диаграммам (5.13) и убедитесь, что вклад последних в энергию дается выражением (5.34) (вклад двух „рукавиц“ объедините в одно слагаемое).

5. Покажите, что для системы в отсутствие внешнего поля, но с взаимодействием, сохраняющим импульс, диаграммы пятого и шестого порядка в ряду (5.41) отсутствуют.

ДИАГРАММНЫЕ МЕТОДЫ В ЗАДАЧЕ МНОГИХ ТЕЛ С ВЫСОТЫ ПТИЧЬЕГО ПОЛЕТА

Этой главой завершается часть книги, соответствующая программе детского сада. Мы довольно подробно разобрали, как работают диаграммные методы квантовой теории поля в случае простых одночастичных систем, а также сумели коснуться и хода событий в задаче многих тел. Все шаги были «обоснованы» с помощью «ссылок на мартышку», т. е. по аналогии с детским бильярдом и его животными (см. фиг. 5). Формализм чисел заполнения (вторичного квантования) существенно не использовался.

Теперь мы переходим к курсу начальной школы. Это означает, что вторичное квантование будет использоваться серьезнее, будет показано больше фокусов с диаграммами, рассмотрено больше настоящих многочастичных систем и будет меньше мартышек. Но, прежде чем продолжать, неплохо было бы остановиться на минутку и бросить взгляд на всю область в целом. В табл. 8 перечислены основные персонажи квантовой теории поля и те роли, которые они исполняют в задаче многих тел.

Различные теоретико-полевые величины 3—7 можно найти, либо решая дифференциальные уравнения, которым они удовлетворяют, либо суммируя бесконечные ряды теории возмущений с помощью диаграмм Фейнмана. В этой книге рассматривается только последний способ. Вот основные его черты.

1. Теоретико-полевая характеристика — назовем ее M (это может быть функция Грина, вакуумная амплитуда и т. д.) — разлагается в ряд нестационарной теории возмущений

$$M = M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)} + \dots$$

Здесь $M^{(0)}$ есть значение величины M в отсутствие взаимодействия, а слагаемые $M^{(1)}$, $M^{(2)}$, ... описывают эффекты

взаимодействия в первом, втором и т. д. порядке. Это разложение можно получить с помощью «интуитивных» методов, как мы делали до сих пор, или с помощью строгой процедуры, требующей использования вторичного квантования (п. 1 и 2 табл. 8). Мы не предполагаем, что члены более высокого порядка малы по сравнению с членом нулевого порядка; действительно, в системах многих частиц из-за сильного взаимодействия они оказываются значительными, а иногда бесконечными!

► *Квантовая теория поля в задаче многих тел*

Таблица 8

Элементы теории поля	Их роль в теории многих тел
1 Система обозначений с помощью чисел заполнения (§ 3 гл. 4, гл. 7)	Позволяет выразить произвольное состояние системы многих тел
2 Операторы рождения и уничтожения (§ 3 гл. 4, гл. 7)	Элементарные операторы, из которых строятся все другие операторы, характеризующие систему многих тел
3 Одночастичная функция Грина (функция распространения) (гл. 2—4, 8—11, 15)	Позволяет вычислить энергии квазичастиц, распределение частиц по импульсам и их концентрацию, энергию основного состояния
4 Вакуумная амплитуда (гл. 5, 12)	Дает энергию основного состояния
5 Двухчастичная функция Грина (гл. 13)	Позволяет вычислить энергии коллективных возбуждений, электропроводность, другие неравновесные свойства
6 Вакуумная амплитуда при конечной температуре (гл. 14)	Дает равновесные термодинамические свойства системы
7 Функция Грина при конечной температуре (гл. 14)	Позволяет найти температурную зависимость всех характеристик, перечисленных в п. 3 настоящей таблицы

2. Каждому члену разложения сопоставляется некоторая диаграмма Фейнмана. Например:

а) одночастичная функция Грина

$$G = \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} + \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \circ \\ \circ \\ \circ \end{array} + \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} + \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} + \dots + \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} | \\ | \\ | \end{array} + \dots$$

б) вакуумная амплитуда

$$R = 1 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \dots$$

в) поляризационная функция Грина (особый случай двух-частичной функции Грина; см. гл. 13)

$$F = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \dots$$

Каждой из прямых и волнистых линий соответствует определенный множитель. Выписав все эти множители, можно полностью восстановить исходный ряд теории возмущений, приведенный в п. 1. В принципе теорию возмущений для системы многих частиц можно построить и без помощи диаграмм, так же как можно путешествовать в джунглях Амазонки без карт. Однако если ими все же пользоваться, то вероятность «уцелеть» будет значительно больше.

3. Ряд теории возмущений вычисляется приближенно путем суммирования диаграмм определенного типа (т. е. членов ряда теории возмущений, соответствующих этим диаграммам) вплоть до бесконечного порядка. Это и есть знаменитое «частичное» или «выборочное» суммирование. Вычисление частичной суммы обычно сводится к тому, чтобы показать, что она выражается через определенный суммируемый бесконечный ряд или эквивалентна некоторому интегральному уравнению, которое кто-нибудь уже решил. Например:

а) одночастичная функция Грина — частичная сумма по повторяющимся пузырям и открытым устрицам

$$G \approx \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \dots$$

дает квазичастицы Харгри — Фока;

б) вакуумная амплитуда — частичная сумма только по кольцевым диаграммам

$$\ln R \approx A + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots$$

дает энергию основного состояния для электронного газа высокой плотности;

в) поляризационная функция Грина — частичная сумма по повторяющимся «парным пузырям»

$$F \approx \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots$$

определяет закон дисперсии плазмонов.

Важный момент состоит в том, что, хотя рассматриваемая методика и использует ряд теории возмущений, она все же существенно отличается от обычной теории возмущений. В последней предполагается, что возмущение мало, и потому абсолютные величины последовательных слагаемых убывают с ростом их порядка

$$M^{(0)} \gg M^{(1)} \gg M^{(2)} \gg M^{(3)} \gg \dots$$

Иными словами, последовательность членов соответствует их порядкам, и мы можем оценить точность приближения по тому, до какого порядка производилось суммирование.

В теории многих тел, напротив, возмущение, как правило, велико, и указанное упорядочение слагаемых по величине не имеет места. Как уже упоминалось, бывают случаи, когда некоторые члены, взятые в отдельности, оказываются бесконечными. Поэтому задача состоит в том, чтобы сгруппировать члены ряда по некоторым типам, выбрать тот тип, который вроде бы дает наибольший вклад, и просуммировать все слагаемые этого типа по всех порядкам.

Конечно, это каверзное дело. Теперь уже невозможно в общем случае оценить точность результата. При отборе главных членов ряда решающую роль играют физические соображения; иногда, однако, их выбор определяется и математическими возможностями. (В качестве обоснования последней процедуры можно услышать слова: «Но это, конечно, лучше, чем вовсе не суммировать!») В некоторых случаях,

как, например, в задаче об электронном газе высокой плотности, метод приводит к результатам, которые в принципе являются точными. Во многих случаях результаты можно проверить, используя какие-либо другие методы. Такие проверки, как правило, дают хорошее согласие.

Следует, однако, признать, что математические основы метода еще поняты не до конца (см. [33]). Например, чтобы отделаться от расходящихся частей ряда, необходимо иногда привлекать «гипотезу исчезновения неприятных расходимостей» (§ 3 гл. 3). Некоторые утверждают, что радиус сходимости рядов теории возмущений равен нулю, однако, как оказывается, частичное суммирование дает результаты, справедливые в довольно широкой области. Поэтому у нас есть все основания ожидать, что когда-нибудь диаграммная техника будет математически обоснована до конца.

ФОРМАЛИЗМ ЧИСЕЛ ЗАПОЛНЕНИЯ (ВТОРИЧНОЕ КВАНТОВАНИЕ)

§ 1. Преимущество формализма чисел заполнения

С языком вторичного квантования, на котором написана современная физика многих тел, мы познакомились в его простейшем виде в § 3 гл. 4 (последний следует прочитать теперь, если это не сделано раньше). Как мы видели, главные элементы этого языка суть волновые функции системы $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$, которые говорят нам, сколько частиц n_i находится в каждом одночастичном состоянии $\phi_i(\mathbf{r})$, и операторы c_i^+ , c_i , рождающие и уничтожающие частицы в этом состоянии. Добавим теперь несколько подробностей — ровно столько, сколько надо, чтобы понять, как на самом деле используется этот аппарат. Однако тем, кто пожелал бы познакомиться со всеми доказательствами и обозреть предмет во всех его регалиях, мы советуем заглянуть в книги Ландау и Лифшица [38] или Дирака [14]. Читатель лучше поймет сокращенные обозначения, используемые в этой главе, если он сначала познакомится с приложением I.

Иногда простые вещи довольно устрашающе выглядят в представлении вторичного квантования. Поэтому неплохо было бы понять, почему именно им пользуются все специалисты по задаче многих тел.

Первая причина в том, что этот аппарат позволяет рассматривать системы, содержащие переменное число частиц. Правда, в большинстве систем, с которыми нам приходится иметь дело при нулевой температуре, число частиц фиксировано. Поэтому может показаться, что такой подход столь же полезен, как пара брюк с пятью штанинами. Оказывается, однако, что формализм становится исключительно гибким, если позволить числу частиц N меняться на промежуточных этапах расчета и фиксировать его только в конце. Например, мы можем по желанию добавлять и исключать пробную частицу,

как это делалось при определении функции Грина, или пользоваться дырочно-частичным формализмом, в котором число частиц и дырок переменено. [Конечно, в статистической механике (гл. 14) использование систем с переменным числом частиц N просто банально.]

Вторая причина — в свойствах симметрии ферми- и бозе-систем. Работая по-старому, мы всегда должны думать об этих сложностях — о том, чтобы волновая функция была должным образом симметризована. В методе вторичного квантования, однако, операторы рождения и уничтожения подчиняются определенным правилам коммутации, в которые уже «заложены» все свойства симметрии системы. Используя только эти правила, мы автоматически избавляемся и от симметризации и от мигрени.

§ 2. Волновая функция системы многих частиц в формализме чисел заполнения

Представим себе систему N тождественных фермионов (бозоны появятся в § 7 настоящей главы), которые в общем случае взаимодействуют друг с другом и с внешним полем. В § 3 гл. 4 мы видели, что такую систему можно описать с помощью совокупности базисных функций $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$, где символ n_i обозначает n_i частиц в невозмущенном одночастичном состоянии, волновая функция ϕ_i которого есть собственная функция оператора энергии. На самом деле в качестве одночастичных функций здесь можно взять любую ортонормированную систему, например, собственные функции оператора координаты (§ 6 настоящей главы); тогда n_i будет обозначать n_i частиц в точке \mathbf{r}_i . Это говорит о том, что в общем случае функции $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ не совпадают с собственными функциями гамильтониана системы взаимодействующих или невзаимодействующих частиц; выбор их определяется соображениями удобства. Пока что мы будем пользоваться теми же одночастичными функциями, что и в § 3 гл. 4, т. е. функциями ϕ , которые удовлетворяют уравнению Шредингера

$$H\phi_{k, \sigma}(\mathbf{r}, \sigma') = \epsilon_{k, \sigma}\phi_{k, \sigma}(\mathbf{r}, \sigma'),$$

где

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \quad (\hbar = 1), \quad (7.1)$$

а σ и σ' — спиновая координата и спиновое квантовое число соответственно. При $U(\mathbf{r}) = 0$ это уравнение имеет решение

$$\begin{aligned}\phi_{k\sigma}(\mathbf{r}, \sigma') &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ik \cdot \mathbf{r}} \eta_{\sigma}(\sigma'), \\ \epsilon_k &= \frac{k^2}{2m} \quad (\hbar = 1),\end{aligned}\quad (7.2)$$

где η — спиновая собственная функция. Как правило, для краткости мы не будем писать индексы σ и σ' , включая их соответственно в \mathbf{k} и \mathbf{r} . Уровни энергии, отвечающие равенствам (7.1) или (7.2), были схематически показаны на фиг. 6, а.

Пусть теперь имеется N тождественных невзаимодействующих фермионов с гамильтонианами (7.1). Тогда полный гамильтониан системы и уравнение Шредингера для нее имеют вид

$$H_0 = \sum_{i=1}^N H_i, \quad H_0 \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (7.3)$$

где

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i), \quad H_i \phi_{k_i} = \epsilon_{k_i} \phi_{k_i}. \quad (7.4)$$

Уравнение (7.3) имеет решение

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_{k_i}(\mathbf{r}_i), \quad E = \sum_i \epsilon_{k_i}. \quad (7.5)$$

Однако, поскольку система состоит из тождественных фермионов, ее волновая функция должна быть антисимметричной, т. е. должна менять знак при перестановке координат любых двух частиц. Этого можно добиться, сконструировав новую функцию Φ в виде суммы

$$\begin{aligned}\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \\ &= \frac{1}{(N!)^{1/2}} \sum_P \gamma_P P [\phi_{k_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \dots \phi_{k_N}(\mathbf{r}_N)],\end{aligned}\quad (7.6)$$

или

$$\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \phi_{k_1}(\mathbf{r}_1) & \phi_{k_1}(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_{k_1}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_{k_N}(\mathbf{r}_1) & \phi_{k_N}(\mathbf{r}_2) & \dots & \phi_{k_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \quad (7.7)$$

В первом выражении P есть оператор перестановки, который меняет местами координаты \mathbf{r}_i всеми возможными способами, начиная с некоторого стандартного их располо-

жения; $\gamma_p = -1$ для нечетного числа перестановок, и $\gamma_p = +1$ для четного числа их. Последняя форма записи — это хорошо известный детерминант Фока — Слэтера; тот факт, что $\Phi = 0$ при совпадении любых двух чисел k_i , означает, что в любом состоянии не может находиться более двух частиц (принцип запрета). Заполнение уровней происходит так, как описывалось в § 2 гл. 4, а энергия любой совокупности заполненных уровней определяется выражением (7.5).

Кое-какие каверзы связаны со знаком определителя (7.7). Например, в системе двух частиц, одна из которых находится в состоянии ϕ_{p_1} [$\equiv \phi_1$; см. замечание относительно системы обозначений после выражения (3.5)!], а другая — в состоянии ϕ_3 , волновая функция есть $\Phi_{k_1=1, k_2=3}$ ($\equiv \Phi_{13}$) или $\Phi_{k_1=3, k_2=1}$ ($\equiv \Phi_{31}$). В силу тождественности частиц эти функции, очевидно, представляют одно и то же состояние, но в соответствии с (7.7) они отличаются знаком. Чтобы исключить эту двусмысленность, мы всегда будем писать Φ со стандартной последовательностью различных k

$$\Phi_{k_1 < k_2 < \dots < k_N}, \quad (7.8)$$

приписывая этой функции знак „+“. Таким образом, выражение Φ_{31} более не может появиться.

Как указывалось в § 3 гл. 4, существует компактный способ записи Φ

$$\begin{aligned} \Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \Phi_{n_1, \dots, n_i, \dots}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \\ &= \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Последнее выражение есть просто другая запись функции Φ , стоящей после первого знака равенства. Величины n_i указывают числа частиц в одночастичных состояниях $\phi_{k_i}(\mathbf{r})$, см. (7.2). Будем пока считать число частиц фиксированным, так что

$$\sum_i n_i = N. \quad (7.10)$$

Для краткости аргументы $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots$ обычно будут опускаться, так что равенство (7.9) примет вид

$$\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N} = \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots} = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (7.11)$$

Лица, знакомые с формализмом Дирака (см. приложение I), узнают в выражении (7.11) вектор состояния в абстрактном пространстве; непосвященные могут рассматривать это просто как сокращенную запись функции (7.9). Простые примеры величин (7.11) уже приводились в гл. 4 [см. (4.7) и (4.8)].

В выражении (7.9) или (7.11) нет ничего таинственного. Его можно рассматривать как новое обозначение для некоторой старой волновой функции или как результат простой замены переменных k_1, \dots, k_i на числа заполнения n_i . Действительно, эту замену можно выразить явно:

$$n_i = \sum_{j=1}^N \delta_{k_j, i}. \quad (7.12)$$

Например, если волновая функция системы двух частиц есть

$$\Phi_{k_1=1, k_2=3} = |1_1 0_2 1_3 0_4 0_5 0_6 \dots\rangle, \quad (7.13)$$

то

$$n_1 = \sum_{j=1}^2 \delta_{k_j, 1} = \delta_{1, 1} + \delta_{3, 1} = 1 \quad (7.14)$$

и т. д. Однако переход от функции Φ_{k_1, \dots, k_N} к $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ не есть унитарное преобразование, разве что в тривиальном смысле, когда матрица преобразования единичная. Чтобы это пояснить, рассмотрим случай $N=2$ с частицами в состояниях ϕ_i и ϕ_j . Тогда в соответствии с (7.11)

$$|00 \dots 1_i \dots 1_j \dots\rangle = \Phi_{k_1=i, k_2=j}. \quad (7.15)$$

Это значит, что роль „преобразования“ играет просто соотношение

$$|00 \dots 1_i \dots 1_j \dots\rangle = \sum_{k_1 < k_2} \delta_{k_1, i} \delta_{k_2, j} \Phi_{k_1 k_2}, \quad (7.16)$$

откуда видно, что коэффициенты преобразования как раз и образуют единичную матрицу. Следует особо отметить, что переход к числам заполнения ни в каком смысле *не есть* унитарное преобразование от „координатного пространства“ к „пространству чисел заполнения“. В этом можно убедиться, явно указав в (7.16) зависимость от \mathbf{r}

$$\Phi_{0, 0, \dots, 1_i, \dots, 1_j, \dots}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{k_1 < k_2} \delta_{k_1, i} \delta_{k_2, j} \Phi_{k_1 k_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (7.17)$$

Важно помнить, что функции $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ ортогональны и нормированы, потому что ортогональны и нормированы функции $\Phi_{k_1, \dots, k_N, \dots}$. Это можно записать различными эквивалентными способами

$$\begin{aligned} \langle n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle &\equiv \\ &\equiv (\Phi_{n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots}, \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots}) \equiv \\ &\equiv \int d^3 \mathbf{r}_1 \dots d^3 \mathbf{r}_N \Phi_{n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots}^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \\ &= \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \dots \delta_{n'_i, n_i} \dots \quad (7.18) \end{aligned}$$

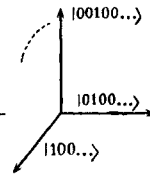
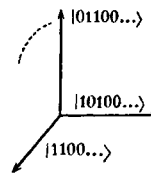
До сих пор мы имели дело с системами, содержащими фиксированное число частиц, и производили лишь сравнительно тривиальную замену переменных в волновой функции. Сделаем теперь важный шаг и, хотя число частиц N в реальной системе фиксировано, позволим ему меняться от 0 до ∞ . В результате появляется система базисных функций, показанная в табл. 9.

Полная система базисных функций, используемых во вторичном квантовании

Таблица 9 ◀

N	$\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}$	$= n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$
0	Φ_0	$ 000 \dots\rangle$
1	$\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \dots$	$ 100 \dots\rangle, 0100 \dots\rangle, 00100 \dots\rangle, \dots$
2	$\Phi_{12}, \Phi_{13}, \Phi_{23}, \dots$	$ 1100 \dots\rangle, 101000 \dots\rangle, 01100 \dots\rangle, \dots$
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮

Состояние, описываемое функцией Φ_0 или $|000 \dots\rangle$, без единой частицы называется „истинным вакуумом“. Совокупность всех функций $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ (или Φ_{k_1, \dots, k_N}) в табл. 9 образует полную ортогональную систему в обобщенном гильбертовом пространстве, в котором число частиц переменное. Это гильбертово пространство можно изобразить следующим образом:

ОБОБЩЕННОЕ ГИЛЬБЕРТОВО ПРОСТРАНСТВО = $\xrightarrow{|000\dots\rangle}$ +  +  + ... (7.19)

Совокупность функций Φ часто называют „базисом чисел заполнения“, а о формализме в целом иногда говорят как о „представлении чисел заполнения“. Обратите особое внимание: мы получили этот новый базис не в результате унитарного преобразования (как, например, бывает при переходе от координатного представления к импульсному), а в результате 1) тривиальной (хотя и удобной) замены переменных k_i на n_i и 2) обобщения гильбертова пространства на случай произвольного числа частиц (это не тривиально). Далее, из-за того, что мы вправе использовать любую

систему одночастичных функций, полученный базис чисел заполнения не единственно возможный. По этой причине лучше было бы говорить о „базисе чисел заполнения энергетических состояний“, имея в виду, что одночастичные функции суть собственные функции оператора энергии, или о „базисе чисел заполнения координат“ (если используются собственные функции оператора координат; см. § 6 настоящей главы) и т. д. В любом случае, однако, каждый базисный вектор отвечает определенному значению n_i , т. е. n_i есть хорошее квантовое число.

До сих пор рассматривались только системы независимых фермионов без какого бы то ни было возмущающего взаимодействия. В присутствии такого взаимодействия функции $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ уже не совпадают с собственными функциями полного гамильтониана системы, и правильные собственные функции должны выражаться как линейные комбинации типа

$$\begin{aligned} \Psi &= \Phi_0 + \sum_{k_1} A_{k_1} \Phi_{k_1} + \sum_{k_1 < k_2} A_{k_1, k_2} \Phi_{k_1, k_2} + \dots = \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_i, \dots} A_{n_1, \dots, n_i, \dots} |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.20)$$

§ 3. Операторы в формализме чисел заполнения

Как указывалось в § 3 гл. 4, все операторы в новом формализме можно выразить через операторы рождения и уничтожения частиц c_i^\dagger , c_i , определяемые соотношениями (4.16). В этих определениях, однако, не учитывался множитель ± 1 , который надо ввести в силу условия антисимметрии. Иными словами, операторы c_i^\dagger и c_i должны обладать следующим свойством: если они действуют в некоторой последовательности на волновую функцию так, что в результате происходит лишь перестановка двух частиц, то волновая функция должна изменить знак. (Вот один из примеров такой последовательности:

$$|1100 \dots\rangle \rightarrow |0110 \dots\rangle \rightarrow |1010 \dots\rangle \rightarrow |1100 \dots\rangle.)$$

Немного подумав, мы увидим, что нас устроили бы следующие определения:

$$\begin{aligned} c_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum i} (1 - n_i) |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum i} n_i |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Здесь

$$(-1)^{\sum i} = (-1)^{[n_1+n_2+\dots+n_{i-1}]}. \quad (7.22)$$

Таким образом, мы получили по множителю (-1) на каждую частицу (каждое занятое состояние), стоящую в волновой функции слева от состояния i . Например,

$$\begin{aligned} c_i | \dots, 0_i, \dots \rangle &= 0, & c_i^\dagger | \dots, 1_i, \dots \rangle &= 0, \\ c_3 | 11111000 \dots \rangle &= + | 11011000 \dots \rangle, \\ c_4^\dagger | 1110100 \dots \rangle &= - | 11111000 \dots \rangle, \\ c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger c_1 | 1100 \dots \rangle &= c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger | 0100 \dots \rangle = \\ &= c_2^\dagger c_3 c_1^\dagger c_2 (-1) | 01100 \dots \rangle = \dots \\ &= - | 1100 \dots \rangle \quad (\text{обмен частицами}). \end{aligned} \quad (7.23)$$

Одно из приятных свойств операторов c_i^\dagger состоит в том, что, действуя ими многократно на состояние „истинного вакуума“ (состояние без единой частицы), можно воссоздать все другие состояния. Так,

$$\Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N} = c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger \dots c_{k_N}^\dagger | 000 \dots \rangle,$$

или

$$| n_1, n_2, \dots \rangle = (c_1^\dagger)^{n_1} (c_2^\dagger)^{n_2} \dots | 0000 \dots \rangle. \quad (7.24)$$

Например,

$$| 011000 \dots \rangle = (c_1^\dagger)^0 (c_2^\dagger)^1 (c_3^\dagger)^1 (c_4^\dagger)^0 \dots | 00 \dots \rangle = c_2^\dagger c_3^\dagger | 00 \dots \rangle. \quad (7.25)$$

Есть еще одно важное свойство операторов c_i^\dagger, c_i — они „эрмитово сопряжены“ друг с другом. В этом можно убедиться, построив для них матрицы (используя в качестве базисных функций $| n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle$)

$$\begin{aligned} \langle n_1, n_2, \dots, n'_i, \dots | c_i | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle &= \begin{matrix} \widehat{} & \widehat{} \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ & \end{matrix} \\ &= (-1)^{\sum i} \times \langle \dots 0_i \dots | \begin{matrix} \boxed{0} & \boxed{1} \\ \boxed{0} & \boxed{0} \end{matrix} | \dots 1_i \dots \rangle \end{aligned} \quad (7.26)$$

$$\begin{aligned}
 \langle n_1, n_2, \dots, n'_i, \dots | c_i^\dagger | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle &= \begin{array}{c} \hat{} \\ \vdots \\ \hat{} \\ 0 \\ \vdots \\ \hat{} \\ \hat{} \end{array} \\
 &= (-1)^{\sum_i} \times \langle \dots 0_i \dots | \begin{array}{|c|c|} \hline 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 \\ \hline \end{array} \dots \rangle \quad (7.27) \\
 &\langle \dots 1_i \dots | \dots \rangle
 \end{aligned}$$

видим, что

$$c_i^\dagger = (c_i)^\dagger, \quad (7.28)$$

где „ \dagger “ означает эрмитово сопряженное. Отсюда также следует, что операторы c_i^\dagger и c_i неэрмитовы и потому не отвечают наблюдаемым величинам.

Легко, однако, построить из c_i^\dagger и c_i эрмитов оператор. Перемножение выписанных выше матриц показывает, что

$$(c_i^\dagger c_i)^\dagger = c_i^\dagger c_i, \quad (7.29)$$

и, следовательно, оператор $c_i^\dagger c_i$ эрмитов. Эта комбинация

$$\hat{n}_i = c_i^\dagger c_i \quad \left(\hat{N} = \sum_i c_i^\dagger c_i \right) \quad (7.30)$$

характеризует исключительно важную наблюдаемую величину и называется оператором числа частиц (\hat{N} — оператор полного числа частиц). Чтобы выяснить его свойства, подействуем им на некоторые типичные векторы состояний:

$$\begin{aligned}
 c_i^\dagger c_i | n_1, n_2, \dots, 1_i, \dots \rangle &= (-1)^{\sum_i} c_i^\dagger | n_1, n_2, \dots, 0_i, \dots \rangle = \\
 &= (-1)^{\sum_i + \sum_i} | n_1, n_2, \dots, 1_i, \dots \rangle = \\
 &= (+1) | n_1, n_2, \dots, 1_i, \dots \rangle.
 \end{aligned}$$

Аналогично

$$c_i^\dagger c_i | n_1, n_2, \dots, 0_i, \dots \rangle = 0 | n_1, n_2, \dots, 0_i, \dots \rangle,$$

так что в общем случае

$$c_i^\dagger c_i | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = n_i | n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle. \quad (7.31)$$

Таким образом, собственное значение оператора числа частиц, принадлежащее состоянию ϕ_i , есть как раз число заполнения этого состояния. Следовательно, в представлении чисел заполнения все операторы числа частиц диагональны

и волновые функции системы $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ суть собственные функции всех операторов $\hat{n}_1, \hat{n}_2, \dots, \hat{n}_i, \dots$

Операторы c_i^\dagger, c_i подчиняются следующим важным фермионным правилам коммутации:

$$\begin{aligned} 1) [c_l, c_k^\dagger]_+ &= c_l c_k^\dagger + c_k^\dagger c_l = \delta_{lk}, \\ 2) [c_l, c_k]_+ &= 0, \\ 3) [c_l^\dagger, c_k^\dagger]_+ &= 0. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Это легко доказать с помощью определений (7.21):

$$\begin{aligned} c_l c_k |n_1, \dots, n_l, \dots, n_k, \dots\rangle &= \\ &= (-1)^{\sum_k n_k} c_l |n_1, \dots, n_l, \dots, n_k - 1, \dots\rangle = \\ &= (-1)^{\sum_k + \sum_l} n_k n_l |n_1, \dots, n_l - 1, \dots, n_k - 1, \dots\rangle, \\ c_k c_l |n_1, \dots, n_l, \dots, n_k, \dots\rangle &= \\ &= (-1)^{\sum_l} n_l c_k |n_1, \dots, n_l - 1, \dots, n_k, \dots\rangle = \\ &= (-1)(-1)^{\sum_k + \sum_l} n_k n_l |n_1, \dots, n_l - 1, \dots, n_k - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Лишний множитель (-1) в четвертой строчке появился из-за того, что слева от состояния k стало на одну частицу меньше. Складывая соотношения (7.33), получаем второе правило (7.32); другие правила можно установить подобным же образом.

Важность этих соотношений „антикоммутиации“ объясняется тем, что в них уже „заложены“ все свойства антисимметрии. Поэтому, используя их в нужных местах, мы не должны беспокоиться не только о симметрии самих волновых функций, но даже и о неудобных множителях $(-1)^{\sum}$. В качестве примера вычислим матричный элемент $\langle \Phi_0 | c_k c_l^\dagger | \Phi_0 \rangle$, где Φ_0 есть волновая функция основного состояния ферми-системы без взаимодействия [см. (4.7)] и предполагается, что $k, l > k_F$. Обычные вычисления дают

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | c_k c_l^\dagger | \Phi_0 \rangle &= (-1)^N \langle \Phi_0 | c_k | 00 \dots 1_l \dots \rangle = \\ &= (-1)^{N+N} \delta_{kl} = \delta_{kl}, \end{aligned} \quad (7.34)$$

где N — число частиц в системе. Используя соотношения коммутации, мы получаем

$$\langle \Phi_0 | c_k c_l^\dagger | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \delta_{kl} - c_l^\dagger c_k | \Phi_0 \rangle = \delta_{kl} - \langle \Phi_0 | c_l^\dagger c_k | \Phi_0 \rangle = \delta_{kl}. \quad (7.35)$$

Последний член здесь исчезает, так как $c_k | \Phi_0 \rangle = 0$ ($k > k_F$, но в состоянии, описываемом функцией $| \Phi_0 \rangle$, нет частиц над k_F). Таким путем мы избежали появления множителя $(-1)^{\sum}$.

Посмотрим теперь, каким образом можно выразить обычные квантовые операторы через c_i^+ и c_i . Имеет смысл напомнить те соображения, которые приводились в § 3 гл. 4. Мы требуем равенства матричных элементов операторов, вычисленных, с одной стороны, в формализме чисел заполнения и, с другой стороны, в старом формализме пещерного человека. Например, в одночастичной системе оператор $\mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ с матричными элементами

$$\mathcal{O}_{ij} = \langle \phi_i | \mathcal{O} | \phi_j \rangle = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \phi_j(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (7.36)$$

в представлении чисел заполнения имеет вид

$$\mathcal{O}^{ч. з} = \sum_{k, l} \mathcal{O}_{kl} c_k^+ c_l. \quad (7.37)$$

Это легко проверить [см. (4.23)]:

$$\begin{aligned} \langle 00 \dots 1_i \dots | \mathcal{O}^{ч. з} | 00 \dots 1_j \dots \rangle &= \\ &= \sum_{k, l} \mathcal{O}_{kl} \langle 00 \dots 1_i \dots | c_k^+ c_l | 00 \dots 1_j \dots \rangle = \\ &= \sum_{k, l} \mathcal{O}_{k, l} \delta_{lj} \delta_{ik} = \mathcal{O}_{ij}. \end{aligned} \quad (7.38)$$

Соотношение (7.38) можно обобщить на случай N частиц. Пусть мы имели оператор

$$\mathcal{O} = \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i), \quad (7.39)$$

например он может отвечать потенциальной энергии во внешнем поле

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i). \quad (7.40)$$

Такие операторы называются *одночастичными*, так как они представляют собой сумму операторов, каждый из которых действует отдельно на одну частицу. Тогда можно показать (доказательство довольно сложно; см. [14]), что по-прежнему имеет место соотношение (7.37), причем величины \mathcal{O}_{kl} , как и раньше, определяются выражением (7.36). Таким образом, мы получили ценный результат: в представлении чисел заполнения одночастичные операторы имеют вид, не зависящий от N . [Сравните с формулой (7.39), где число N содержится явно!]

Аналогично можно показать, что *двухчастичный* оператор

$$\mathcal{O} = \sum_{\substack{i, j=1 \\ (i \neq j)}}^N \mathcal{O}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i; \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j), \quad (7.41)$$

как, например, потенциал взаимодействия

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j=1 \\ (i \neq j)}}^N V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (7.42)$$

принимает вид

$$\mathcal{O}^{q, 3} = \sum_{klmn} \mathcal{O}_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n, \quad (7.43)$$

где

$$\mathcal{O}_{klmn} = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') \mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathbf{p}, \mathbf{p}') \phi_m(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}') \quad (7.44)$$

(обратите внимание на измененный порядок индексов k, l у операторов c, c^\dagger). Отметим, что результаты (7.37) и (7.43) остаются справедливыми и в случае бозонов.

§ 4. Гамильтониан и уравнение Шредингера в формализме чисел заполнения

Переведем на язык вторичного квантования гамильтониан системы N тождественных фермионов во внешнем поле $U(\mathbf{r})$ (для бозонов получается такой же результат). Пусть частицы взаимодействуют посредством двухчастичного потенциала вида (7.42), и пусть сверх того имеется еще внешний возмущающий потенциал $V(\mathbf{r})$. В обозначениях каменного века мы имеем

$$H = \underbrace{\sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right]}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i, j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}_{H_1} + \underbrace{\sum_i V(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)}_{H_2}. \quad (7.45)$$

Первый член здесь имеет вид одночастичного оператора \mathcal{O} из (7.39). Поэтому в соответствии с выражениями (7.36) и (7.37)

$$H_0 = \sum_{k, l} \langle \phi_k | \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) | \phi_l \rangle c_k^\dagger c_l. \quad (7.46)$$

Если функции ϕ_k выбраны так, чтобы они были собственными функциями оператора $p^2/2m + U(\mathbf{r})$, принадлежащими

собственным значениям ϵ_k , то [см. соотношение (I.22) в приложении I]

$$H_0 = \sum_{k, l} \epsilon_k \delta_{kl} c_k^\dagger c_l = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k. \quad (7.47)$$

Подобным же образом с помощью равенства (7.43) переводится и оператор H_1 :

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n} V_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n, \quad (7.48)$$

где

$$V_{klmn} = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_m(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}'). \quad (7.49)$$

Наконец, согласно (7.37), оператор H_2 принимает вид

$$H_2 = \sum_{k, l} V_{kl} c_k^\dagger c_l, \quad V_{kl} = \int d^3\mathbf{r} \phi_k^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \phi_l(\mathbf{r}). \quad (7.50)$$

[Заметим, что в соотношениях (7.49) и (7.50) символ $\int d^3\mathbf{r}$ сокращенно обозначает интегрирование по \mathbf{r} и суммирование по спиновым квантовым числам.] Таким образом, в представлении вторичного квантования гамильтониан H записывается в виде

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n} V_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n + \sum_{k, l} V_{kl} c_k^\dagger c_l. \quad (7.51)$$

Решим для практики уравнение Шредингера $H\Psi = E\Psi$ в формализме чисел заполнения для нескольких тривиальных случаев. Предположим сначала, что $V_{klmn} = 0$ и $V_{kl} = 0$, тогда

$$H|\Psi\rangle = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k |\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (7.52)$$

Обычно это уравнение записывают в форме (7.3). Легко видеть, что решение (7.52) есть

$$|\Psi\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (7.53)$$

Действительно, в соответствии с (7.31)

$$\sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \sum_k \epsilon_k n_k |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle. \quad (7.54)$$

Собственные значения энергии, очевидно, равны

$$E = \sum_k \epsilon_k n_k. \quad (7.55)$$

Это есть сумма энергий отдельных частиц — тот же результат, что и в (7.5).

Другой простой пример дает нам система N свободных частиц при наличии возмущения (3.19):

$$V(\mathbf{p}) = Mp^2 + Lp^4 = -MV_r^2 + LV_r^4. \quad (7.56)$$

Согласно (3.27) и (3.29), мы имеем

$$V_{kl} = (Mk^2 + Lk^4) \delta_{kl}. \quad (7.57)$$

Следовательно, оператор (7.51) в данном случае имеет вид

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \frac{k^2}{2m} c_k^\dagger c_k + \sum_{k,l} (Mk^2 + Lk^4) \delta_{kl} c_k^\dagger c_l = \\ &= \sum_k \frac{k^2}{2m} c_k^\dagger c_k + \sum_k (Mk^2 + Lk^4) c_k^\dagger c_k. \end{aligned} \quad (7.58)$$

Очевидно, это есть просто гамильтониан системы частиц с энергиями

$$\epsilon_k'' = \frac{k^2}{2m} + Mk^2 + Lk^4 \quad (7.59)$$

— в точном соответствии с формулой (3.24). Собственные функции гамильтониана (7.58) даются выражением (7.53), а собственные значения энергии суть

$$E = \sum_k \epsilon_k'' n_k. \quad (7.60)$$

Третий пример относится к системе из одной частицы, на которую действует возмущающее внешнее поле $V(\mathbf{r})$. В этом случае уравнение Шредингера имеет вид

$$H\Psi = (H_0 + V)\Psi = E\Psi,$$

где

$$H_0\phi_k = \epsilon_k\phi_k. \quad (7.61)$$

Соответственно для энергии получается секулярное уравнение

$$\det[(\epsilon_i - E)\delta_{ij} + V_{ij}] = 0. \quad (7.62)$$

В сверхпростом случае, когда все матричные элементы $V_{ij} = 0$, кроме V_{pq} и V_{qp} , уравнение (7.62) принимает вид

$$(\epsilon_1 - E)(\epsilon_2 - E) \dots \begin{vmatrix} \epsilon_p - E & V_{pq} \\ V_{qp} & \epsilon_q - E \end{vmatrix} \dots = 0;$$

решение его для $i \neq p, q$ есть

$$E = \epsilon_i, \quad (7.63)$$

в противном случае

$$E = \frac{\varepsilon_p + \varepsilon_q}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_q)^2 + |V_{pq}|^2}. \quad (7.64)$$

Посмотрим теперь, как решается эта задача в формализме чисел заполнения. Мы имеем

$$H|\Psi\rangle = \left[\sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \sum_{kl} V_{kl} c_k^\dagger c_l \right] |\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (7.65)$$

Поскольку имеется всего одна частица,

$$|\Psi\rangle = \sum_j A_j |00 \dots 1_j \dots\rangle. \quad (7.66)$$

Подставляя это выражение в уравнение (7.65) и умножая слева на $\langle 00 \dots 1_i \dots |$, получаем

$$\sum_j A_j [H_{ij} - E\delta_{ij}] = 0, \quad (7.67)$$

где

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle 00 \dots 1_i \dots | H | \dots 1_j \dots \rangle = \\ &= \sum_k \varepsilon_k \langle \dots 1_i \dots | c_k^\dagger c_k \dots 1_j \dots \rangle + \sum_{k,l} V_{kl} \langle \dots 1_i \dots | c_k^\dagger c_l | \dots 1_j \dots \rangle = \\ &= \varepsilon_i \delta_{ij} + V_{ij}. \end{aligned} \quad (7.68)$$

Очевидно, отсюда сразу вытекает уравнение (7.62).

В реальной задаче многих тел мы чаще всего будем иметь дело со случаем, когда внешний потенциал равен нулю, а потенциал взаимодействия зависит только от расстояния между парами частиц. Тогда гамильтониан H имеет вид (7.51) при $V_{kl} = 0$, а величины ε_k и ϕ_k определяются соотношениями (7.2). Найдем для этого случая матричные элементы V_{klmn} . Воспользовавшись выражениями (7.49) и (7.2) (следует помнить, что $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}$, σ) и просуммировав по спиновой переменной, получаем

$$\begin{aligned} V_{k\sigma_1, l\sigma_2, m\sigma_3, n\sigma_4} &= \\ &= \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4}}{\Omega^2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i[(\mathbf{k}-\mathbf{m})\cdot\mathbf{r} + (\mathbf{l}-\mathbf{n})\cdot\mathbf{r}']}. \end{aligned} \quad (7.69)$$

Формула упростится, если выразить V через фурье-трансформанту V_q :

$$V_{k\sigma_1, \dots, n\sigma_4} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} V_{(\mathbf{k}-\mathbf{m})\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{l}, m+n},$$

или

$$V_{m+q, \sigma_1, n-q, \sigma_2; m\sigma_3, n\sigma_4} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} V_q. \quad (7.70)$$

Здесь δ -функции выражают сохранение спинового момента (так как в оператор V спин не входит) и полного импульса

(энергия взаимодействия V зависит только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и потому не может сместить центр инерции). Отметим, что оператор энергии взаимодействия в формуле (7.51) сохраняет также и число частиц, так как выражается через одинаковое число операторов рождения и уничтожения.

В кулоновском случае, когда $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = e^2/|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$, можно показать (см. [55]), что

$$V_{k\sigma_1, \dots, n\sigma_4} = \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4}}{\Omega} \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{m}|^2} \delta_{k+l, m+n}$$

или

$$V_{m+q, \sigma_1, n-q, \sigma_2; m\sigma_3, n\sigma_4} = \delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4} \frac{4\pi e^2}{q^2} \times \frac{1}{\Omega}. \quad (7.71)$$

Мы используем эти соотношения в гл. 12, когда будем рассматривать задачу об электронном газе.

§ 5. Дырочно-частичный формализм

В § 3 гл. 4 было показано, каким образом можно избавиться от большей части лишнего багажа в схеме чисел заполнения, если принять основное состояние ферми-системы без взаимодействия за „вакуум“ и описывать отклонения от него в терминах *частиц* и дырок. Поскольку эта процедура была рассмотрена довольно подробно, мы добавим здесь лишь несколько замечаний.

Прежде всего, так как *частицы* в дырочно-частичном формализме существуют только выше уровня Ферми ϵ_F , а дырки — только ниже его, мы можем написать

$$\mathbf{k}_{\text{дыр}} \neq \mathbf{k}_{\text{ч. а. с. т.}} \quad (7.72)$$

Во-вторых, в простых примерах (4.20) мы пренебрегали правильным знаком, который должен возникнуть из-за множителя $(-1)^{\sum_i}$ в формуле (7.21). На практике этой проблемы можно избежать, если расширить соотношения коммутации (7.32) на предмет учета дырок. Воспользуемся соотношениями (7.32) и введем туда операторы a и b , определяемые равенствами (4.18) и (4.19). Полная совокупность правил для всех этих операторов примет вид

$$\begin{aligned} [a_k, a_l^+]_+ &= \delta_{kl}, & [a_k, a_l]_+ &= [a_k^+, a_l^+]_+ = 0, \\ [b_m, b_p^+]_+ &= \delta_{mp}, & [b_m, b_p]_+ &= [b_m^+, b_p^+]_+ = 0, \\ [a_k, b_m]_+ &= [a_k, b_m^+]_+ = [a_k^+, b_m]_+ = [a_k^+, b_m^+]_+ = 0 \end{aligned} \quad (7.73)$$

[чтобы получить последнюю строчку, мы воспользовались неравенством (7.72)]. Пусть, например, надо вычислить среднее значение $\langle 0 | b_l b_k^\dagger | 0 \rangle$, где функция $|0\rangle$ описывает ферми-вакуум. Попытаться явно включить сюда множитель $(-1)^{\sum_i i}$ было бы довольно хлопотно. А с помощью соотношений (7.73) все получается очень просто:

$$\langle 0 | b_l b_k^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \delta_{kl} - b_k^\dagger b_l | 0 \rangle = \delta_{kl}. \quad (7.74)$$

Подобно (7.35), последний член здесь равен нулю, ибо в ферми-вакууме нет дырок. [Общий метод вычисления матричных элементов типа (7.74) состоит в том, чтобы, применяя соотношения коммутации, последовательно переносить все операторы уничтожения a_k и b_k направо, где они действуют на волновую функцию ферми-вакуума и дают нуль. Это может оказаться очень утомительным; более простой метод, использующий *теорему Вика*, излагается в приложении VI.]

Довольно просто переписать многочастичный гамильтониан (7.47), (7.48) и (7.50) в дырочно-частичной схеме. Пользуясь определениями (4.18) и (4.19) и правилами (7.73), мы получаем

$$H_0 = \sum_{k < k_F} \epsilon_k - \sum_{k < k_F} \epsilon_k b_k^\dagger b_k + \sum_{k > k_F} \epsilon_k a_k^\dagger a_k. \quad (7.75)$$

Оператор $b_k^\dagger b_k$ есть как раз оператор числа дырок; следовательно, второй член здесь явно показывает, что дырки обладают отрицательной энергией. Первый член есть просто энергия ферми-вакуума. Подобным же образом находим

$$\begin{aligned} H_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n > k_F} V_{klmn} a_l^\dagger a_k^\dagger a_m a_n + \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, l, m > k_F \\ n < k_F}} V_{klmn} a_l^\dagger a_k^\dagger a_m b_n^\dagger + \dots \\ & \dots + \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n < k_F} V_{klmn} b_l b_k b_m^\dagger b_n^\dagger \end{aligned} \quad (7.76)$$

и

$$\begin{aligned} H_2 = & \sum_{m, n > k_F} V_{mn} a_m^\dagger a_n + \sum_{\substack{m > k_F \\ n < k_F}} V_{mn} a_m^\dagger b_n^\dagger + \\ & + \sum_{\substack{m < k_F \\ n > k_F}} V_{mn} b_m a_n + \sum_{m, n < k_F} V_{mn} b_m b_n^\dagger. \end{aligned} \quad (7.77)$$

Наконец, следует заметить, что по той же причине, по какой отрицательна энергия дырки [см. (4.2)], справедливы и соотношения

$$\begin{aligned} \text{Импульс дырки} &= -\mathbf{k}, \\ \text{Спин дырки} &= -\sigma. \end{aligned} \quad (7.78)$$

§ 6. Формализм чисел заполнения и собственные функции одночастичного оператора координаты

До сих пор мы пользовались базисными функциями, представляющими собой собственные функции одночастичного гамильтониана, т. е. оператора энергии. Однако нет такого закона, который бы запрещал использовать любую удобную систему одночастичных функций, например собственных функций оператора импульса или координаты. Рассмотрим случай, когда в качестве базисных берутся собственные функции оператора координаты $\hat{\mathbf{r}}$. Эта схема оказывается очень полезной.

Одночастичный оператор координаты приводит нас к следующей задаче на собственные значения:

$$\hat{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \mathbf{R}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}). \quad (7.79)$$

Здесь собственное значение \mathbf{R} есть координата любой точки пространства, а δ — дельта-функция Дирака, описывающая частицу, находящуюся точно в точке \mathbf{R} . Формулы (7.3) и (7.7) дают оператор H_0 полной энергии N частиц и антисимметризованную собственную функцию этого оператора. Аналогично мы имеем теперь оператор центра инерции системы N частиц

$$\mathcal{R} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}_i \quad (7.80)$$

с собственной функцией

$$\Phi_{R_1, R_2, \dots, R_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1) & \dots & \delta(\mathbf{r}_N - \mathbf{R}_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_N) & \dots & \delta(\mathbf{r}_N - \mathbf{R}_N) \end{vmatrix}. \quad (7.81)$$

(Конечно, это не есть собственная функция H_0 !) Для простоты мы опустили спин.

Переход к схеме чисел заполнения производится следующим образом [ср. (4.6) или (7.9)]:

$$\begin{aligned} \Phi_{R_1, R_2, \dots, R_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \Phi_{n_{x_1}, n_{x_2}, \dots, n_{x_i}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \\ &\equiv |n_{x_1}, n_{x_2}, \dots, n_{x_i}, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.82)$$

Здесь символ n_{x_i} означает n_{x_i} частиц в одночастичном состоянии $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_i)$, т. е. n_{x_i} частиц в точке \mathbf{x} (для ферми-системы, как и раньше, $n_{x_i} = 0$ или 1). Таким образом, функция $|n_{x_1}, n_{x_2}, \dots, n_{x_i}, \dots\rangle$ описывает распределение частиц в пространстве.

Аналогично операторы рождения и уничтожения здесь суть $c_{x_i}^\dagger, c_{x_i}$; они соответственно рожают и уничтожают частицу в точке \mathbf{x}_i . Эти операторы обычно записывают в неудачной форме, в которой они выглядят, как обычные волновые функции:

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(\mathbf{x}_i) &\equiv c_{x_i}^\dagger - \text{рождает частицу в точке } \mathbf{x}_i, \\ \psi(\mathbf{x}_i) &\equiv c_{x_i} - \text{уничтожает частицу в точке } \mathbf{x}_i. \end{aligned} \quad (7.83)$$

Операторы $\psi^\dagger(\mathbf{x})$ и $\psi(\mathbf{x})$ играют главную роль в квантовой теории поля. Комбинация

$$\rho(\mathbf{x}) = \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \quad (7.84)$$

представляет собой оператор числа частиц; собственные функции его имеют вид (7.82). Поскольку собственные значения этого оператора равны числам частиц в точке \mathbf{x} , он, очевидно, представляет собой просто оператор плотности частиц.

Легко показать, что операторы $\psi^\dagger(\mathbf{x}_i), \psi(\mathbf{x}_i)$ связаны с операторами c_i^\dagger, c_i из (7.21) тем же самым преобразованием, которое переводит собственные функции $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ в функции $\phi_k(\mathbf{r})$. Так, мы имеем

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_i) = \sum_k A_{ik} \phi_k(\mathbf{r}),$$

или

$$|00 \dots 1_{x_i} \dots 00 \dots\rangle = \sum_k A_{ik} |00 \dots 1_k \dots 00 \dots\rangle,$$

или

$$c_{x_i}^\dagger |000 \dots\rangle = \sum_k A_{ik} c_k^\dagger |000 \dots\rangle,$$

откуда

$$\begin{aligned}\psi^\dagger(\mathbf{x}_i) &= \sum_k A_{ik} c_k^\dagger, \\ \psi(\mathbf{x}_i) &= \sum_k A_{ik}^* c_k.\end{aligned}\quad (7.85)$$

Коэффициент A_{ik} равен

$$A_{ik} = \int d^3\mathbf{r} \phi_k^*(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x}_i) = \phi_k^*(\mathbf{x}_i). \quad (7.86)$$

Применяя это преобразование, легко показать, что гамильтониан (7.51) выражается через полевые операторы следующим образом:

$$\begin{aligned}H &= \int d^3\mathbf{x} \psi^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{1}{2m} \nabla_x^2 + U(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}) + \\ &+ \frac{1}{2} \int \int d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{x}' V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \psi^\dagger(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}).\end{aligned}\quad (7.87)$$

Например, подставляя операторы (7.85) в первый член H (полагая $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}_i$)

$$H_0 = \int d^3\mathbf{x}_i \sum_{k,l} A_{ik} c_k^\dagger \left[-\frac{1}{2m} \nabla_{x_i}^2 + U(\mathbf{x}_i) \right] A_{il}^* c_l \quad (7.88)$$

и используя соотношение (7.86), мы получаем

$$\begin{aligned}H_0 &= \sum_{k,l} c_k^\dagger c_l \int d^3\mathbf{x}_i \phi_k(\mathbf{x}_i) \varepsilon_l \phi_l^*(\mathbf{x}_i) = \\ &= \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k;\end{aligned}\quad (7.89)$$

это есть наш прежний результат (7.47).

Преобразование (7.85) позволяет выделить в операторах „частичную“ и „дырочную“ части

$$\begin{aligned}\psi^\dagger(\mathbf{x}_i) &= \sum_{k > k_F} A_{ik} a_k^\dagger + \sum_{k < k_F} A_{ik} b_k = \\ &= \psi_{\text{част}}^\dagger(\mathbf{x}_i) + \psi_{\text{дыр}}(\mathbf{x}_i), \\ \psi(\mathbf{x}_i) &= \psi_{\text{дыр}}^\dagger(\mathbf{x}_i) + \psi_{\text{част}}(\mathbf{x}_i),\end{aligned}\quad (7.90)$$

где $\psi_{\text{част}}^\dagger(\mathbf{x}_i)$ рождает *частицу* в точке \mathbf{x}_i , $\psi_{\text{дыр}}(\mathbf{x}_i)$ уничтожает дырку и т. д.

§ 7. Бозоны

Повесть о числе заполнения легко переписать так, чтобы главным ее героем стал бозон. Результаты, которые при этом получаются, очень похожи на формулы (1.37)–(1.42). Это не случайно: ведь фононы — тоже бозоны. Мы имеем:

1. Функция $\Phi_{k_1, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ из формулы (7.6) заменяется симметризованной комбинацией

$$\begin{aligned} \Phi_{k_1, k_2, \dots, k_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \\ &= \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{N!}} \sum_P (+1)^P [\phi_{k_1}(\mathbf{r}_1) \dots \phi_{k_N}(\mathbf{r}_N)] = \\ &= \Phi_{n_1, \dots, n_i, \dots}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \equiv \langle \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle; \end{aligned} \quad (7.91)$$

здесь

$$n_i = 0, 1, 2, 3, \dots$$

2. Операторы c_i^+ , c_i переопределяются следующим образом:

$$\begin{aligned} c_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ c_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.92)$$

3. Соотношения коммутации (7.32) заменяются на

$$\begin{aligned} \text{а) } [c_l, c_k^+]_- &= c_l c_k^+ - c_k^+ c_l = \delta_{lk}, \\ \text{б) } [c_l, c_k]_- &= 0, \\ \text{в) } [c_l^+, c_k^+]_- &= 0. \end{aligned} \quad (7.93)$$

4. В случае бозонов нет дырок, а поэтому нет и дырочно-частичного формализма.

5. Одно- и двухчастичные операторы остаются такими же, как и в случае фермионов; следовательно, остается в силе и выражение для гамильтониана¹⁾.

Литература для дальнейшего чтения:

Ландау, Лифшиц [38].

ДИРАК [14].

ШВЕБЕР [61].

ШРИФФЕР [58].

¹⁾ Это несправедливо для фононов, когда гамильтониан взаимодействия может включать в себя произведение любого числа операторов рождения и уничтожения (см. [67], а также гл. 16).

Упражнения ●

1. Вычислите $c_1 c_5^\dagger c_2 |111000\dots\rangle$.
2. Вычислите $\langle \Psi | c_1^\dagger c_1 | \Psi \rangle$, где $|\Psi\rangle = A |100\dots\rangle + B |111000\dots\rangle$. [Не забудьте, что $\langle \Psi | = |\overline{\Psi}\rangle$ (см. приложение I, формулу (I.18)), и используйте выражение (7.18).]
3. Проверьте правила коммутации (7.32) для специального случая, когда функция $|\Psi\rangle$ определена, как в упражнении 2 [т. е. покажите, например, что $(c_1 c_2^\dagger + c_2^\dagger c_1) |\Psi\rangle = 0$ и т. д.].
4. Выпишите гамильтониан в форме вторичного квантования для системы, описанной в упражнении 1 к гл. 3. Выберите в качестве базисных собственные функции гармонического осциллятора.
5. Система из упражнения 1 к гл. 3 подвергается воздействию возмущения из упражнения 2 к гл. 3. Найдите вид энергии возмущения в представлении вторичного квантования.
6. Вычислите в представлении вторичного квантования гамильтониан взаимодействия для системы фермионов (без внешнего поля), в которой энергия взаимодействия между частицами имеет вид $A\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$. Спином можно пренебречь.
7. Проверьте дырочно-частичные правила коммутации (7.73).
8. Проверьте правильность выражения (7.75).

ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ

КВАЗИЧАСТИЧНОГО ОПИСАНИЯ

§ 1. Когда квазичастичный подход терпит неудачу

В качестве первого приложения метода вторичного квантования попытаемся выяснить некоторые аспекты квазичастичной картины, которые остались туманными во время полукачественных рассуждений в первой части книги. Напомним прежде всего утверждение из гл. 1: было сказано, что в большинстве систем многих тел исходный гамильтониан с сильным взаимодействием между частицами

$$H = \sum_i H_0(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) \quad (8.1)$$

$$\left(\text{или } H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} V_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n \right)$$

можно преобразовать к виду

$$H' = E_0 + \sum_q \epsilon'_q A_q^\dagger A_q + \underbrace{f(\dots, A_q, \dots, A_q^\dagger, \dots)}_{\text{Малая величина}}. \quad (8.2)$$

Выражение (8.2) описывает систему приближенно независимых элементарных возбуждений с энергиями ϵ'_q над основным состоянием E_0 , слабо взаимодействующих друг с другом (малый член f). Это было проиллюстрировано для коллективных возбуждений на примере перехода к картине фононов. Было замечено, однако, что в общем случае слишком трудно перейти от гамильтониана (8.1) к (8.2) с помощью канонического преобразования, вот почему мы и обратились к квантовой теории поля; последняя позволяет прямо определять величины ϵ'_q через полюсы функции Грина $G(q, \omega)$. В частности, все наши примеры квазичастиц рассматривались с помощью этого метода.

Чтобы лучше понять соотношение между каноническим преобразованием и методами квантовой теории поля, полезно было бы иметь какой-нибудь простой пример, показывающий как преобразование (8.1) \rightarrow (8.2) осуществляется в случае квазичастичных возбуждений в ферми-системах. В § 2 этой главы мы приведем как раз такой пример — модельную систему с „чисто хартриевским“ гамильтонианом, которая допускает несложную точную трактовку как с помощью теоретико-полевого метода, так и канонического преобразования. Оба метода дают один и тот же ответ: элементарные возбуждения оказываются совокупностью n квазичастиц и равного им числа квазидырок (плюс член взаимодействия).

На примере этой простой модели можно понять, почему число квазичастиц и квазидырок n должно быть значительно меньше полного числа N голых частиц в системе. Это следует из анализа гамильтониана взаимодействия. Чтобы квазичастичная картина была обоснованной, взаимодействие должно быть слабым; оказывается, что оно мало, только если $n \ll N$. Лишь в этом случае мы можем говорить, что полная энергия возбуждения равна сумме энергий индивидуальных квазичастиц и квазидырок.

Другое ограничение квазичастичного подхода состоит в том, что он пригоден только для квазичастиц и дырок вблизи поверхности Ферми. Дело в том, что при увеличении разности между $|\mathbf{k}|$ и k_F время жизни квазичастиц и дырок становится слишком малым.

Отметим один важный момент, который может вызвать значительную путаницу: слово „квазичастица“ в случае ферми-систем используется в двух разных смыслах. В том смысле, как мы его употребляем здесь [см. (8.2)], оно означает элементарное возбуждение над основным состоянием, при этом есть два типа фермионных квазичастиц: квазичастицы и квазидырки. Существует, однако, „интуитивное“ определение квазичастиц, введенное Л. Д. Ландау (см. [1]), которое очень близко к картине классических квазионов, изображенных на фиг. 3. Согласно Ландау, всю систему взаимодействующих частиц в основном состоянии можно представить себе как заполненную квазичастицами вплоть до поверхности Ферми: имеется N квазичастиц Ландау — по одной на каждую затравочную частицу. При этом возбужденные состояния образуются, когда квазичастицы Ландау выбиваются из сферы Ферми и, таким образом, создаются квазичастицы и дырки — те самые, с которыми мы имеем дело.

Такая картина хороша, пока мы остаемся достаточно проницательными и отдаем себе отчет в условиях ее примени-

мости. Во-первых, она имеет смысл только для квазичастиц Ландау вблизи поверхности Ферми; в противном случае время жизни слишком мало. Так что, хотя мы и говорим „ N квазичастиц Ландау“, это имеет только формальный смысл, поскольку реально можно говорить лишь о тех квазичастицах, у которых волновое число $|\mathbf{k}|$ близко к k_F . Отсюда следует также, что если $n_{\mathbf{k}}$ есть число квазичастиц Ландау в состоянии \mathbf{k} , то слова „ $n_{\mathbf{k}} = 0$ для $|\mathbf{k}| > k_F$ и $n_{\mathbf{k}} = 1$ для $|\mathbf{k}| < k_F$ “ имеют смысл только вблизи поверхности Ферми. Наконец, хотя мы и говорим об основном состоянии как о „заполненном N квазичастицами Ландау вплоть до $|\mathbf{k}| = k_F$ “, мы не можем исследовать свойства основного состояния в рамках такой модели; в частности, энергия основного состояния не равна сумме энергий квазичастиц Ландау.

Последнее ограничение квазичастичного подхода — это его непригодность на интервалах времени, следующих сразу же после того, как затравочная частица введена в систему: должно пройти некоторое время, пока она успеет „одеться“. Это требует добавления к функции Грина поправочного члена, который мы рассмотрим в последнем параграфе настоящей главы.

§ 2. Система ферми-частиц, допускающая точное решение: чисто хартриевская модель

Пусть мы имеем систему N фермионов в отсутствие внешнего поля, причем взаимодействие между частицами проявляется только в рассеянии вперед:

$$V_{klmn} = V_{klkl} \delta_{mk} \delta_{nl} \quad (8.3)$$

[сравните с формулой (4.66), когда энергия взаимодействия лишь приближенно относилась к этому типу]. Подставляя этот матричный элемент в общее выражение для гамильтониана (7.51), получаем

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{kl} V_{klkl} c_l^{\dagger} c_k^{\dagger} c_{\mathbf{k}} c_l. \quad (8.4)$$

Для системы с полным гамильтонианом (7.51) можно найти лишь приближенные значения энергий квазичастиц. Мы увидим, однако, что в случае простого модельного гамильтониана (8.4) решение получается точное.

Модельный гамильтониан (8.4) будет называться „чисто хартриевским“, ибо, как мы увидим, его действие сводится только к появлению „эффективного поля Хартри“ [рассматривавшегося ранее в связи с формулой (4.73)]. Наша цель —

получить решение задачи в виде (8.2), т. е. показать, что энергия системы складывается из энергии основного состояния и совокупности почти независимых элементарных возбуждений (в данном случае — квазичастиц) над основным состоянием. Проведем это, сначала пользуясь непосредственно диаграммным методом, а потом получим тот же результат с помощью канонического преобразования.

Энергии взаимодействия (8.3) отвечают только следующие простые диаграммы:

(8.5)

[мы воспользовались здесь диаграммами (4.44)]. Следовательно, это единственные диаграммы, которые дают вклад в энергию основного состояния (5.42):

$$E_0 = W_0 + \underbrace{\text{diagram}}_{(k \neq l)} + \left[\text{diagram} + \text{diagram} \right]$$

Действительно, немного повозившись, легко убедиться, что с помощью только элементов (8.5) нельзя построить никаких других диаграмм из ряда (5.42). [Отметим, что все линии функций Грина на этих диаграммах, так же как и на диаграммах (4.54) и (4.55), дырочные. Не лишне также обратить внимание на то, что диаграммы в квадратных скобках не удовлетворяют принципу запрета, ибо содержат одновременно по две дырочные линии в состоянии k .] Вычислим теперь E_0 , воспользовавшись выражением (5.44). Получим

$$E_0 = \sum_{k < k_F} \epsilon_k + \frac{1}{2} \sum'_{k, l < k_F} V_{klkl}. \tag{8.6}$$

[Как видно из (5.44), диаграммы с $k = l$ взаимно уничтожаются; штрих у суммы означает, что $k \neq l$.]

Определим теперь энергии квазичастиц ϵ'_k через полюсы функции Грина. Последняя в рассматриваемом случае точно равна сумме только пузырей:

(8.7)

Действительно, никакие другие диаграммы ряда (4.63) нельзя построить с помощью только элементов (8.5). [Сравните с выражением (4.67)! Там функция Грина лишь приближенно равнялась сумме пузырей.]

Ряд (8.7) уже был просуммирован ранее [см. (4.67)], и для энергии квазичастиц мы получили [см. (4.70)]

$$\begin{aligned} \varepsilon'_k &= \varepsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{klkl}, & k > k_F, \\ \tau_k &= \infty. \end{aligned} \quad (8.8)$$

В случае квазидырок суммирование тоже несложно:

$$+ \left[\begin{array}{c} \downarrow k \\ \downarrow k \end{array} \text{---} \text{bubble} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{bubble} \\ \downarrow k \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \downarrow k \\ \downarrow k \end{array} \text{---} \text{bubble} \text{---} \text{bubble} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{bubble} \\ \downarrow k \end{array} \text{---} \text{bubble} \right] + \dots \quad (8.9)$$

Диаграммы в квадратных скобках взаимно уничтожаются, и мы получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon'_k &= \varepsilon_k + \sum'_{l < k_F} V_{klkl}, & k < k_F, \\ \tau_k &= \infty. \end{aligned} \quad (8.10)$$

Результаты (8.6), (8.8) и (8.10) можно объединить и представить в форме гамильтониана (8.2)

$$\begin{aligned} H' &= \left[\sum_{k < k_F} \varepsilon_k + \frac{1}{2} \sum'_{k, l < k_F} V_{klkl} \right] + \\ &+ \sum_{k > k_F} \left(\varepsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{klkl} \right) A_k^\dagger A_k - \sum_{k < k_F} \left(\varepsilon_k + \sum'_{l < k_F} V_{klkl} \right) B_k^\dagger B_k + \\ &+ f(\dots, A_k, \dots, A_k^\dagger, \dots, B_k, \dots, B_k^\dagger, \dots). \end{aligned} \quad (8.11)$$

Здесь A_k^\dagger , A_k , B_k^\dagger , B_k суть операторы рождения и уничтожения квазичастиц и квазидырок соответственно. Знак „-“ поставлен перед членом с $B_k^\dagger B_k$ потому, что в соответствии

с отношением (4.2) энергия дырки (а следовательно, и квазидырки) отрицательна. Функция f описывает взаимодействие между квазичастицами [см. (8.15)].

Попробуем теперь получить тот же результат с помощью метода канонического преобразования. Для этого надо найти такое преобразование, которое превращало бы выражение (8.4) во что-нибудь вроде (8.11). Это был бы частный случай преобразования (8.1) \rightarrow (8.2). Трудность с методом преобразования становится очевидной немедленно. С чего надо начинать? В отличие от диаграммного метода у нас нет кулинарной книги, которая давала бы необходимые рецепты. Однако, как и в примере с фононами, оказывается, что требуемое здесь преобразование исключительно несложно — фактически это просто преобразование (4.19), переводящее выражение (8.4) на язык обычных дырочно-частичных операторов:

$$\begin{aligned} c_i &= \theta_{k_i - k_F} a_i + \theta_{k_F - k_i} b_i^\dagger, \\ c_i^\dagger &= \theta_{k_i - k_F} a_i^\dagger + \theta_{k_F - k_i} b_i. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Прежде чем выполнять это преобразование, попробуем несколько покрутить выражение (8.4), дабы представить его в более прозрачном виде. Из правил коммутации (7.32) следует, что

$$c_l^\dagger c_k^\dagger c_k c_l = -c_k^\dagger c_l^\dagger \delta_{kl} + c_k^\dagger c_k c_l^\dagger c_l. \quad (8.13)$$

Подставляя это в (8.4), получаем

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2} \sum_k V_{kkkk} c_k^\dagger c_k + \\ &+ \frac{1}{2} \sum'_{kl} V_{klkl} c_k^\dagger c_k c_l^\dagger c_l + \frac{1}{2} \sum_k V_{kkkk} c_k^\dagger c_k c_k^\dagger c_k = \\ &= \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum'_{kl} V_{klkl} c_k^\dagger c_k c_l^\dagger c_l. \end{aligned} \quad (8.14)$$

[Второе и четвертое слагаемые в ферми-системе взаимно компенсируются, так как оператор $c_k^\dagger c_k c_k^\dagger c_k$, действуя на произвольную волновую функцию вида (7.20), дает тот же результат, что и $c_k^\dagger c_k$: n_k равно только 0 или 1.] Подставляя операторы c_k из (8.12) в выражение (8.14), используя тот

факт, что $b_k b_k^\dagger = 1 - b_k^\dagger b_k$, и группируя члены, получаем

$$\begin{aligned}
 H' = & \left[\sum_{k < k_F} \epsilon_k + \frac{1}{2} \sum'_{k, l < k_F} V_{klkl} \right] + \\
 & + \sum_{k > k_F} \left(\epsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{klkl} \right) a_k^\dagger a_k - \sum_{k < k_F} \left(\epsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{klkl} \right) b_k^\dagger b_k + \\
 & + \left[\frac{1}{2} \sum'_{kl > k_F} V_{klkl} a_k^\dagger a_k a_l^\dagger a_l - \sum_{\substack{k > k_F \\ l < k_F}} V_{klkl} a_k^\dagger a_k b_l^\dagger b_l + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} \sum'_{k, l < k_F} V_{klkl} b_k^\dagger b_k b_l^\dagger b_l \right]. \quad (8.15)
 \end{aligned}$$

Сравнение выражений (8.15) и (8.11) показывает, что квази-частичные операторы A_k^\dagger , A_k в этом простом случае оказываются обычными операторами частиц a_k^\dagger , a_k , а операторы квазидырок — операторами дырок b_k^\dagger , b_k . Последний член (в квадратных скобках) описывает взаимодействие между квазичастицами и квазидырками. Видим, таким образом, что в результате канонического преобразования получается (8.15), т. е. тот же ответ, что и с помощью диаграмм. Тем самым иллюстрируется эквивалентность диаграммного метода и метода преобразований.

§ 3. Почему число квазичастиц должно быть малым

Как объяснялось в гл. 1, чтобы квазичастичная картина была пригодной, член взаимодействия должен быть малым; в противном случае нельзя рассматривать квазичастицы как независимые. В гл. 2 [после выражения (2.2)] указывалось, что число квазичастиц n должно быть значительно меньше N , числа реальных частиц. Попробуем теперь объединить эти требования, показав на примере чисто хартриевской модели, что неравенство $n \ll N$ как раз и составляет условие слабости взаимодействия. Следует отметить, что этот результат справедлив в общем случае для систем, содержащих квазичастицы. Чисто хартриевский частный случай рассматривается только ради упрощения выкладок.

Пусть модельная система находится в возбужденном состоянии

$$|\Psi\rangle = |1_{k_1}^p, 1_{k_2}^p, \dots, 1_{k_n}^p; 1_{l_1}^h, \dots, 1_{l_n}^h\rangle, \quad (8.16)$$

содержащем n частиц и n дырок. [Отметим, что функция (8.16) есть точная собственная функция системы, потому что в гамильтониане (8.15) фигурируют только операторы *числа частиц* и дырок.] Вклад в энергию этого состояния от каждого члена (8.15) рассчитывается следующим образом (введем обозначение $\epsilon'_k = \epsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{klkl}$):

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \sum_{k > k_F} \epsilon'_k a_k^\dagger a_k | \Psi \rangle &= \sum_{k > k_F} \epsilon'_k \langle 1_{k_1}^p \dots 1_{l_n}^h | a_k^\dagger a_k | 1_{k_1}^p \dots 1_{l_n}^h \rangle = \\ &= \sum_{k_1}^{k_n} \left(\epsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{klkl} \right) = n (\bar{\epsilon}_{\text{част}} + N\bar{V}). \end{aligned} \quad (8.17)$$

Здесь N — число реальных частиц в системе (равное числу состояний ниже поверхности Ферми), $\bar{\epsilon}_{\text{част}}$ — среднее значение энергии возбуждения *частиц*, \bar{V} — среднее значение V_{klkl} . Аналогично находим [H'_1 описывает взаимодействие квазичастиц в гамильтониане (8.15)]

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \sum_{k < k_F} \epsilon'_k b_k^\dagger b_k | \Psi \rangle &\sim n (\bar{\epsilon}_{\text{дыр}} + N\bar{V}), \\ \langle \Psi | H'_1 | \Psi \rangle &\sim n^2 \bar{V}, \\ E_0 &\sim W_0 + \frac{1}{2} \bar{V} N^2. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Мы интересуемся величиной энергии остаточного взаимодействия между квазичастицами по сравнению с энергиями самих квазичастиц или дырок. Отношение этих энергий составляет

$$\frac{\langle H'_1 \rangle}{\langle \sum \epsilon'_k a_k^\dagger a_k \rangle} \sim \frac{n^2 \bar{V}}{n (\bar{\epsilon}_{\text{част}} + N\bar{V})} \sim \frac{n}{N}. \quad (8.19)$$

Здесь сделано предположение, что мы имеем дело с обычным случаем сильного взаимодействия, встречающимся в системах многих частиц, когда $N\bar{V} \gg \bar{\epsilon}_{\text{част}}$. Следовательно, можно считать, что гамильтонианы (8.11) и (8.15) описывают почти независимые квазичастицы, только когда число квазичастиц мало по сравнению с полным числом частиц в системе.

Теперь самое время явно показать, почему нужно быть осторожным, используя описанную в § 1 настоящей главы модель „квазичастиц Ландау“. Допустим, мы наивно считаем, что система взаимодействующих частиц в основном состоянии „заполнена“ до уровня Ферми квазичастицами

с энергией ϵ'_k [см. (8.10)], так же как система невзаимодействующих частиц заполнена истинными частицами. Тогда для энергии основного состояния получаем

$$E_0 = \sum_{k < k_F} \epsilon_k + \sum'_{k, l < k_F} V_{klkl}, \quad (8.20)$$

что неверно, как можно видеть, сравнивая выражения (8.20) и (8.6). Вклад от взаимодействия здесь в два раза больше, чем нужно. Это еще одно свидетельство „двойного учета“, о котором уже говорилось в связи с формулой (2.2). Именно мы учитывали взаимодействие V_{klkl} дважды — один раз в эффективном поле, действующем со стороны частицы в состоянии l на частицу в состоянии k , а другой раз в эффективном поле, действующем со стороны k на l . Когда же мы пользуемся выражением (8.15) и считаем, что $n \ll N$, мы избегаем двойного учета.

§ 4. Грубый расчет времени жизни квазичастицы

Второе ограничение, о котором мы упоминали, состоит в том, что квазичастичный подход терпит неудачу, когда энергии квазичастиц слишком сильно отличаются от энергии Ферми. Чтобы понять это, рассмотрим сначала критерий (3.17). В ферми-системе, когда мы имеем дело с частицеподобными возбуждениями над ϵ'_F (энергией Ферми системы с взаимодействием) и дырководобными возбуждениями ниже ϵ_F , энергия, фигурирующая в критерии, должна отсчитываться от ϵ'_F , т. е.

$$\frac{1}{\tau_k} \ll \epsilon'_k - \epsilon'_F. \quad (8.21)$$

В чисто хартриевской модели $\tau_k = \infty$ [см. (8.10)], поэтому критерий удовлетворяется для любых k . Но это несправедливо в общем случае. Мы же сейчас собираемся показать, что в большинстве ферми-систем время жизни квазичастицы удовлетворяет соотношению

$$\frac{1}{\tau_k} \sim (\epsilon'_k - \epsilon'_F)^2. \quad (8.22)$$

Следовательно, когда энергия ϵ'_k слишком далека от ϵ'_F , время жизни τ_k оказывается слишком коротким, чтобы удовлетворить неравенству (8.21), и квазичастичная картина становится непригодной. Соотношение (8.22) будет получено

более строго в гл. 11; здесь мы дадим лишь грубое квази-доказательство его.

Время жизни квазичастицы в состоянии с импульсом \mathbf{k} равно обратной величине вероятности переходов, отнесенной к единице времени, — вероятности рассеяния квазичастицы с уходом ее из состояния \mathbf{k} за счет столкновений с другими квазичастицами. Сделаем вид, что столкновения между квазичастицами напоминают столкновения между реальными частицами (на самом деле это не так, ибо взаимодействие между квазичастицами может быть „запаздывающим“, т. е. может зависеть от времени, даже когда „голые“ частицы взаимодействуют мгновенно; см. § 4 гл. 10). Приняв эту гипотезу, вычислим вероятность перехода из состояния \mathbf{k}_1 ($|\mathbf{k}_1| \geq k_F$). При типичном акте взаимодействия данная частица сталкивается с частицей в состоянии $|\mathbf{k}_2| \leq k_F$, в результате чего появляются частицы в состоянии \mathbf{k}_3 и \mathbf{k}_4 ; причем вследствие сохранения импульса

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3. \quad (8.23)$$

Вероятность перехода есть

$$W_{k_1} \sim \int d^3\mathbf{k}_2 \int d^3\mathbf{k}_3 |V_{k_1, k_1+k_2-k_3, k_1, k_2}|^2, \quad (8.24)$$

где матричные элементы V_{klmn} даются соотношением (4.42).

При вычислении интегралов (8.24) нужно принять во внимание, что в соответствии с принципом Паули все состояния ниже k_F заняты, поэтому

$$|\mathbf{k}_3| \geq k_F, \quad |\mathbf{k}_4| \geq k_F; \quad (8.25)$$

далее в силу закона сохранения энергии

$$k_1^2 + k_2^2 = k_3^2 + k_4^2. \quad (8.26)$$

Соотношения (8.25) и (8.26) вместе означают, что

$$k_1^2 + k_2^2 \geq 2k_F^2. \quad (8.27)$$

Рассмотрим сначала предельный случай, когда $|\mathbf{k}_1| = k_F$. Тогда из неравенства (8.27) следует, что $k_2^2 \geq k_F^2$. Но $|\mathbf{k}_2| \leq k_F$; это означает, что $|\mathbf{k}_2| = k_F$. Подобным же образом $|\mathbf{k}_3| = |\mathbf{k}_4| = k_F$. Иными словами, все импульсы лежат на сфере Ферми. Допустим теперь, что $|\mathbf{k}_1| = k_F + \delta$, где $k_F \gg \delta > 0$. Тогда в силу неравенства (8.27) $|\mathbf{k}_2| \geq k_F - \delta$. Равным образом, поскольку $|\mathbf{k}_2| \leq k_F$, то, чтобы выполнялось соотношение (8.26), величины $|\mathbf{k}_3|$ и $|\mathbf{k}_4|$ должны быть меньше $k_F + \delta$. Следовательно, все импульсы лежат в шаровом слое

толщины $\delta = |\mathbf{k}_1| - k_F$ около сферы Ферми. Допустим, что в поведении потенциала V нет никаких странностей; тогда легко показать, что интеграл по \mathbf{k}_2 , взятый по объему данного шарового слоя, дает множитель $\sim 4\pi k_F^2 (|\mathbf{k}_1| - k_F)$. Такой же множитель получаем и от интеграла по \mathbf{k}_3 , поэтому

$$W_{k_1} \sim (|\mathbf{k}_1| - k_F)^2. \quad (8.28)$$

Но

$$\epsilon_{k_1} - \epsilon_F \sim (k_1^2 - k_F^2) = (|\mathbf{k}_1| - k_F)(|\mathbf{k}_1| + k_F) \approx 2k_F (|\mathbf{k}_1| - k_F). \quad (8.29)$$

Следовательно,

$$\frac{1}{\tau_k} = W_k \sim (\epsilon_k - \epsilon_F)^2, \quad (8.30)$$

чем и „оправдывается“ оценка (8.22), в предположении, что квазичастицы взаимодействуют, грубо говоря, так же, как и реальные частицы.

Отметим, что в специальном случае модельного взаимодействия (8.3) мы имеем $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_3$; при этом легко показать, что в соответствии с приведенными выше соображениями область интегрирования имеет нулевой объем, так что $W=0$, и, следовательно, время жизни бесконечно в согласии с результатом (8.10).

§ 5. Общая форма записи функции Грина для квазичастицы

Квазичастичная формула (3.15) достаточно хороша для описания квантового детского бильярда и приближения Хартри — Фока; в случае более сложных ситуаций ее надо несколько обобщить. Прежде чем вводить более общее выражение, вспомним, что нам известно о функциях Грина.

В соответствии с выражениями (3.2) и (4.29) одночастичная функция Грина определяется равенством

$$G(k_2, k_1, t_2 - t_1) = G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1)_{t_2 > t_1} + G^-(k_2, k_1, t_2 - t_1)_{t_2 < t_1}, \quad (8.31)$$

где

$$iG^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = \text{Амплитуда вероятности того, что если в момент времени } t_1 \text{ к системе взаимодействующих частиц в основном состоянии добавляется частица в состоянии } \phi_{k_1}, \text{ то в момент } t_2 \text{ система будет находиться в основном состоянии, а добавленная частица — в состоянии } \phi_{k_2}; \quad (8.32a)$$

$-iG^-(k_2, k_1, t_2 - t_1) =$ Амплитуда вероятности того, что если в момент времени t_2 к системе взаимодействующих частиц в основном состоянии добавляется дырка в состоянии ϕ_{k_2} , то в момент t_1 система будет находиться в основном состоянии, а добавленная дырка — в состоянии ϕ_{k_1} ; (8.32б)

(Знак „-“ перед функцией G^- ставится только для фермионов; для бозонов надо писать $+iG^-$.)

Функции G^\pm для случая свободных частиц даются выражениями (3.9), (3.13), (4.31), (4.32). Эти результаты можно записать в компактной форме, если ввести функции

$$\theta_x = \begin{cases} 1 & \text{для } x > 1 \\ 0 & \text{для } x < 1 \end{cases}, \quad \delta_k = \begin{cases} +\delta, & \varepsilon_k > \varepsilon_F \\ -\delta, & \varepsilon_k < \varepsilon_F \end{cases}. \quad (8.33)$$

Тогда, используя выражение (8.31) и полагая $t = t_2 - t_1$, мы получаем

$$G_0(k, t) = -i \left[\theta_t \theta_{\varepsilon_k - \varepsilon_F} e^{-i\varepsilon_k t} - \theta_{-t} \theta_{\varepsilon_F - \varepsilon_k} e^{-i\varepsilon_k t} \right] \quad (8.34)$$

и

$$G_0(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\delta_k} \quad (8.35)$$

(относительно слагаемого $i\delta$ см. приложение IX).

В гл. 3 мы доказали из физических соображений, что в системах, описываемых с помощью квазичастиц, функция Грина G выглядит так же, как и G_0 ; надо лишь заменить ε_k на ε'_k и ввести время жизни τ_k [см. (3.15)]. Однако этот рецепт не совсем верен, ибо он не учитывает того факта, что, когда голую частицу вводят в систему, ей требуется некоторое время, скажем t_c , чтобы „одеться“. Иначе говоря, частица не будет вести себя как квазичастица до тех пор, пока разность $t_2 - t_1$ не станет больше t_c . Далее можно показать, что квазичастичное выражение для функции Грина становится несправедливым, когда $t_2 - t_1 \gg \tau_k$, где τ_k — время жизни. По этой причине надо записывать функцию Грина в виде суммы „чисто квазичастичной“ функции и поправочного члена, который будет важен при $t < t_c$ и $t > \tau_k$.

Еще один вопрос возникает в связи с тем, что может оказаться невозможным добавить в ферми-систему „целую“ частицу в состоянии ϕ_k , так как это состояние может быть уже занято — целиком или частично — другой частицей. Так, если мы попытаемся добавить частицу в состояние $k < k_F$

к системе невзаимодействующих частиц, то мы увидим, что это невозможно, так как названное состояние уже занято; поэтому в данном случае $G = 0$. В системе с взаимодействием состояния k , как показано на фиг. 10, заняты частично. Чтобы учесть это обстоятельство, необходимо ввести амплитудный множитель $Z_k < 1$.

Неплохо было бы включить в определение функции Грина также и „квазидырочную“ часть аналогично тому, как дырочная часть была введена в свободную функцию Грина [см. (8.34) и (8.35)].

Из этих соображений получаем ($t = t_2 - t_1$)

$$G_{\text{квазичаст}}(k, t) = -iZ_k \left[\theta_t \theta_{\varepsilon'_k - \varepsilon'_F} e^{-i(\varepsilon'_k - i\tau_k^{-1})t} - \theta_{-t} \theta_{\varepsilon'_F - \varepsilon'_k} e^{-i(\varepsilon'_k + i\tau_k^{-1})t} \right] + F(k, t). \quad (8.36)$$

Здесь $0 < Z_k \leq 1$ (Z_k не зависит от $t!$), ε'_F — энергия Ферми для системы с взаимодействием, а $F(k, t)$ — поправочный член. Фурье-трансформанта функции Грина имеет вид

$$G_{\text{квазичаст}}(k, \omega) = \frac{Z_k}{\omega - \varepsilon'_k + i \left[2\theta_{\varepsilon'_k - \varepsilon'_F} - 1 \right] \tau_k^{-1}} + F(k, \omega). \quad (8.37)$$

Следует помнить, что квазичастицы хорошо определены, только если выполняется условие (8.21), т. е.

$$\frac{1}{\tau_k} \ll \varepsilon'_\kappa - \varepsilon'_f.$$

Наконец, несколько слов о подозрительном поправочном члене F . Скептикам может показаться, что в него упаковано так много грехов, что квазичастичное выражение становится бесполезным. Это неверно, так как мы, разумеется, требуем, чтобы слагаемое F не содержало ничего, что могло бы компенсировать член с Z_k (!!). Существуют также определенные „правила сумм“, которым эта поправка должна удовлетворять [см. (9.25)], но в других отношениях никаких особых ограничений на нее не накладывается. Есть основание ожидать, что функция F достаточно регулярна и, по-видимому, мала. Можно показать, что она описывает коллективные возбуждения в системе, но мы не будем здесь этим заниматься.

Литература для дальнейшего чтения:

НОЗЬЕР [48],
 АБРИКОСОВ, ГОРЬКОВ, ДЗЯЛОШИНСКИЙ [1],
 ФАЛИКОВ [16].

Упражнения ●

1. С помощью правил, приведенных в табл. 7, докажите, что в выражении (8.9) диаграммы в квадратных скобках компенсируют друг друга.
2. Проверьте правильность соотношения (8.15).
3. Энергия и время жизни квазичастиц в электроинном газе даются (в приближении РРА) выражением (10.46). Принимая $r_s = 1$ (случай высокой плотности), оцените по порядку величины, как далеко от поверхности Ферми квазичастичная картина все еще пригодна.
4. Покажите, что выражение (8.37) вытекает из (8.36).

ОПЯТЬ ОБ ОДНОЧАСТИЧНОЙ

ФУНКЦИИ ГРИНА

§ 1. Вторичное квантование и функция Грина

В предыдущих главах мы использовали интуитивный подход к квантовой функции Грина, определив ее физически и получив ее диаграммное разложение в ряд теории возмущений по аналогии со случаем детского бильярда. Хотя способ такого рода и хорош для того, чтобы быстро войти в курс дела, он имеет очевидные ограничения. Поэтому в настоящей главе мы собираемся провести более строгое рассмотрение функции Грина с помощью метода вторичного квантования.

Введя операторы $c_k^\dagger(t)$ и $c_k(t)$, рождающие и уничтожающие частицу в момент времени t , мы сможем написать простое и компактное математическое выражение для функции Грина. Привыкнув к нему, мы увидим, что работать с ним намного легче, чем со словесным определением (8.31), (8.32), и что выражение это существенно облегчает понимание свойств функции Грина. Оно вскрывает также и суть диаграммного разложения, так как может быть представлено в виде ряда теории возмущений, причем каждому слагаемому этого ряда соответствует одна из построенных нами ранее диаграмм.

В последней части этой главы мы посмотрим, как можно несколько упростить ряд теории возмущений, принимая во внимание „топологию“ диаграмм.

§ 2. Математическое выражение для одночастичной функции Грина

Функцию Грина G можно представить в виде одного из двух компактных выражений

$$G(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | T \{ c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^\dagger(t_1) \} | \Psi_0 \rangle, \quad (9.1)$$

или

$$G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \psi(\mathbf{r}_2, t_2) \psi^\dagger(\mathbf{r}_1, t_1) \} | \Psi_0 \rangle. \quad (9.2)$$

Мы будем рассматривать только первую форму; те же рассуждения годятся и для второй. Будет изучен смысл каждой величины из выражения (9.1) и будет показано, что это выражение в точности совпадает с определением (8.31), (8.32).

Прежде всего Ψ_0 есть точная волновая функция основного состояния системы N взаимодействующих частиц. Операторы $c_k(t)$ и $c_k^\dagger(t)$ уничтожают и рождают частицу в состоянии с импульсом \mathbf{k} в момент времени t . Более точно, это есть обычные операторы c_k, c_k^\dagger в представлении Гейзенберга (см. [58]):

$$\begin{aligned} c_{k_1}^\dagger(t_1) &= e^{+iHt_1} c_{k_1}^\dagger e^{-iHt_1}, \\ c_{k_2}(t_2) &= e^{+iHt_2} c_{k_2} e^{-iHt_2}, \end{aligned} \quad (9.3)$$

где H — гамильтониан системы с взаимодействием [например, оператор (7.51)]. Фигурирующие в выражениях (9.3) экспоненциальные операторы определены в приложении II, (II.3).

Наконец, виковский оператор упорядочения во времени T определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} T \{ A(t_1) B(t_2) \dots \} &= (-1)^P \times \text{Операторы, перегруппированные} \\ &\quad \text{так, что время уменьшается слева} \\ &\quad \text{направо, если никакие из двух} \\ &\quad \text{времен не совпадают,} \\ &= (-1)^P \times \text{Операторы, перегруппированные} \\ &\quad \text{так, что в случае совпадающих} \\ &\quad \text{времен все операторы } c^\dagger \text{ (или } a^\dagger, \\ &\quad \text{или } b) \text{ стоят слева от опера-} \\ &\quad \text{торов } c \text{ (или } a, \text{ или } b^\dagger). \end{aligned} \quad (9.4)$$

Здесь P есть число перестановок, необходимых для приведения операторов в требуемый временной порядок, отправляясь от того порядка, в котором они стоят в скобках. Таким образом,

$$\begin{aligned} T \{ c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^\dagger(t_1) \} &= c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^\dagger(t_1), & t_2 > t_1, \\ &= -c_{k_1}^\dagger(t_1) c_{k_2}(t_2), & t_2 \leq t_1. \end{aligned} \quad (9.5)$$

[Обратите внимание: множитель $(-1)^P$ в случае бозе-частиц отсутствует.] Следовательно, функцию Грина G можно переписать в виде

$$\begin{aligned} G &= G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^\dagger(t_1) | \Psi_0 \rangle, & t_2 > t_1, \\ G &= G^-(k_2, k_1, t_2 - t_1) = +i \langle \Psi_0 | c_{k_1}^\dagger(t_1) c_{k_2}(t_2) | \Psi_0 \rangle, & t_2 \leq t_1. \end{aligned} \quad (9.6)$$

Рассмотрим сначала случай $t_2 > t_1$. Подставляя сюда формулы (9.3), имеем

$$G^+ = -i \underbrace{\langle \Psi_0 | e^{iHt_2} c_k}_{B^+} \underbrace{e^{-iH(t_2-t_1)} c_{k_1}^\dagger e^{-iHt_1} | \Psi_0 \rangle}_A. \quad (9.7)$$

Выражение $\exp(-iHt)$ представляет собой оператор временной эволюции системы (см. приложение II). Поэтому $\exp(-iHt_1) | \Psi_0 \rangle$ есть волновая функция основного состояния в момент времени t_1 , а $c_{k_1}^\dagger \exp(-iHt_1) | \Psi_0 \rangle$ есть волновая функция такого состояния, которое получено путем добавления к основному состоянию системы в момент времени t_1 одной частицы с одночастичной волновой функцией ϕ_{k_1} . Следовательно, выражение

$$A = e^{-iH(t_2-t_1)} c_{k_1}^\dagger e^{-iHt_1} | \Psi_0 \rangle \quad (9.8)$$

есть волновая функция системы в момент времени t_2 при условии, что в момент времени t_1 к ней добавлена частица с волновой функцией ϕ_{k_1} .

Смысл функции B^+ явствует из выражения

$$B^+ = \overline{c_{k_2}^\dagger e^{-iHt_2} | \Psi_0 \rangle} \quad (9.9)$$

[см. приложение I, (I.18)]. Это есть, очевидно, комплексно сопряженная волновая функция системы с одной частицей в состоянии ϕ_{k_2} , добавленной к основному состоянию в момент времени t_2 . Следовательно,

$$\begin{aligned} G^+ = B^+ A &= \text{Компонента функции } B \text{ вдоль } A = \\ &= \text{Амплитуда вероятности того, что состояние системы в момент } t_2 \text{ при условии, что в момент } t_1 \text{ к системе была добавлена частица в состоянии } \phi_{k_1}, \\ &\text{совпадает с состоянием той же системы, полученным добавлением одной частицы в состоянии } \phi_{k_2} \\ &\text{в момент времени } t_2. \end{aligned} \quad (9.10)$$

Эта формулировка, очевидно, есть просто попытка пересказать определение (8.32а) с набитым ртом. Применяя тот же метод к функции G^- в (9.6), приходим к определению (8.32б). Тем самым доказывается полная эквивалентность равенств (9.1) и (8.32). Те же рассуждения годятся и в случае (9.2) в применении к операторам $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi^\dagger(\mathbf{r})$, определяемым соотношениями (7.83).

Используемый здесь формализм показывает, что процесс „добавления частицы в состоянии ϕ_{k_1} “ не так прост, как могло бы показаться. Рассмотрим, например, специальный

случай одночастичной системы, находящейся в точном основном состоянии

$$|\Psi_0\rangle = B|1000 \dots\rangle + D|0100 \dots\rangle, \quad (9.11)$$

где

$$|B|^2 + |D|^2 = 1, \quad |B|^2 > 0, \quad (9.12)$$

и представим себе, что мы пытаемся добавить в момент $t_1 = 0$ частицу в низшем одночастичном состоянии ϕ_1 . Тогда

$$c_1^\dagger e^{-iH_0} |\Psi_0\rangle = c_1^\dagger |\Psi_0\rangle = 0 + D|1100 \dots\rangle. \quad (9.13)$$

Отсюда видно, что „добавление частицы“ сопряжено с удалением „части“ старой частицы, пребывавшей в состоянии ϕ_1 в B -компоненте волновой функции $|\Psi_0\rangle$; при этом частицу можно добавить, только если для нее есть свободное место в D -компоненте.

Положим теперь $t_1 = 0$, $t_2 = t$ и найдем функцию $G(1, 1, t)$ сразу после добавления к системе частицы в состоянии ϕ_1 (т. е. пусть $t \rightarrow 0^+$)

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0^+} G(1, 1, t) &= \lim_{t \rightarrow 0^+} -i \langle \Psi_0 | c_1(t) c_1^\dagger(0) | \Psi_0 \rangle = \\ &= -i \langle \Psi_0 | c_1 c_1^\dagger | \Psi_0 \rangle = \\ &= -i |D|^2 \langle 0100 \dots | 0100 \dots \rangle = -i |D|^2. \end{aligned} \quad (9.14)$$

При этом мы использовали соотношение (7.18).

Согласно (9.12), $|D|^2$ меньше единицы. Отсюда явствует, что даже сразу после добавления частицы в состоянии с волновой функцией ϕ_1 вероятность обнаружить ее там меньше единицы, ибо названное состояние уже было занято в $|\Psi_0\rangle$ с вероятностью $|B|^2$. В самом деле, если $D = 0$, то, согласно (9.14), $G = 0$ (частица не распространяется) просто потому, что при этом невозможно добавить частицу в состоянии ϕ_1 к $|\Psi_0\rangle$ — нельзя уехать в уже набитом автобусе.

Одночастичная система представляет собой, конечно, специальный случай, однако [используя для Ψ_0 выражение (7.20), а не (9.11) и разбивая его на две части, в одной из которых $n_{k_1} = 1$, а в другой $n_{k_1} = 0$] можно убедиться в том, что так же обстоит дело и в системе многих тел. Именно по этой причине в выражение для функции Грина квазичастицы (8.36) и вводят перенормировочный множитель Z_k .

В качестве упражнения полезно посмотреть, как выражение (9.1) в случае отсутствия взаимодействия переходит в формулу (8.34) для функции Грина свободной частицы.

Гамильтониан и волновая функция основного состояния системы без взаимодействия имеют вид

$$H_0 = \sum_{\rho} \varepsilon_{\rho} c_{\rho}^{\dagger} c_{\rho}, \quad H_0 |\Phi_0\rangle = \sum_{\rho < k_F} \varepsilon_{\rho} |\Phi_0\rangle, \quad |\Phi_0\rangle = |111 \dots 1_F 000 \dots\rangle. \quad (9.15)$$

Вычислим функцию G_0^{\dagger} , полагая $t_1 = 0$, $t_2 = t$:

$$G_0^{\dagger}(k, t) = -i \langle \Phi_0 | e^{+iH_0 t} c_k e^{-iH_0 t} c_k^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \theta_t. \quad (9.16)$$

Используя очевидные обозначения, имеем

$$c_k^{\dagger} |\Phi_0\rangle = (-1)^N |\Phi_0, 1_k\rangle \theta_{\varepsilon_k - \varepsilon_F}. \quad (9.17)$$

Таким образом, k должно быть больше, чем k_F . Далее

$$H_0 |\Phi_0, 1_k\rangle = \sum_{\rho} \varepsilon_{\rho} c_{\rho}^{\dagger} c_{\rho} |\Phi_0, 1_k\rangle = \left[\sum_{\rho < k_F} \varepsilon_{\rho} + \varepsilon_k \right] |\Phi_0, 1_k\rangle. \quad (9.18)$$

Поэтому, согласно приложению II, формула (II.7),

$$c_k e^{-iH_0 t} |\Phi_0, 1_k\rangle = (-1)^N |\Phi_0\rangle \exp \left\{ -i \left[\sum_{\rho < k_F} \varepsilon_{\rho} + \varepsilon_k \right] t \right\}. \quad (9.19)$$

Наконец, действуя оператором $\exp(iH_0 t)$, получаем

$$G_0^{\dagger}(k, t) = -i \theta_{\varepsilon_k - \varepsilon_F} \theta_t e^{-i\varepsilon_k t}, \quad (9.20)$$

что совпадает с (8.34).

Пользуясь функцией Грина (9.1), легко получить среднее по основному состоянию от любого одночастичного оператора (7.37)

$$\langle \Psi_0 | \mathcal{O} | \Psi_0 \rangle = i \sum_{kl} \mathcal{O}_{kl} \lim_{t \rightarrow 0^-} G(l, k; t). \quad (9.20a)$$

С помощью функции Грина можно найти также и энергию основного состояния системы (см. [64] или [60]).

§ 3. Спектральная функция¹⁾

Анализ математических свойств функции Грина, в особенности ее „аналитических свойств“, проводится с помощью специального инструмента, называемого „спектральной функцией“ $A^{\pm}(\mathbf{k}, \omega)$. Проф. Шриффер называет эту функцию „по-

¹⁾ Автор использует термин „функция спектральной плотности“. Мы, однако, будем придерживаться более широко употребляемого в советской литературе термина „спектральная функция“. — *Прим. перев.*

лишеном“, указывающим вам на то, что вы где-то нарушили правила в вычислениях с функциями Грина. В настоящей книге, однако, мы не собираемся производить каких-либо детальных расчетов в задаче многих тел. Поэтому для наших целей эта функция не нужна. Тем не менее, поскольку в литературе эти „полимены“ встречаются гораздо чаще, чем сами функции Грина, стоит потратить время на то, чтобы познакомиться с их формой. За деталями следует обратиться к приложению VIII и к книге [52].

Идея такая же, как и при разложении любой зависящей от времени функции $f(t)$ в интеграл по частотам

$$f(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega. \quad (9.21)$$

Здесь функция $F(\omega)$ определяет „спектр“ $f(t)$. Соответствующее выражение для функции Грина системы в отсутствие внешнего потенциала (см. приложение VIII) есть

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, t) &= -i \int_0^{\infty} d\omega A^+(\mathbf{k}, \omega) e^{-i(\omega + \mu)t}, & t > 0, \\ &= +i \int_0^{\infty} d\omega A^-(\mathbf{k}, \omega) e^{+i(\omega - \mu)t}, & t < 0, \end{aligned} \quad (9.22)$$

где μ — химический потенциал, причем

$$\mu = \left[\begin{array}{l} \text{Энергия основного со-} \\ \text{стояния системы } N \\ \text{взаимодействующих} \\ \text{частиц} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Энергия основного со-} \\ \text{стояния системы } N-1 \\ \text{взаимодействующих} \\ \text{частиц} \end{array} \right] = E_0^N - E_0^{N-1}; \quad (9.23)$$

$A^{\pm}(\mathbf{k}, \omega)$ есть „спектральная функция“, аналогичная $F(\omega)$ в выражении (9.21).

Преобразование Фурье соотношения (9.22) приводит к равенству

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \int_0^{\infty} d\omega' \left\{ \frac{A^+(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu + i\delta} + \frac{A^-(\mathbf{k}, \omega')}{\omega' + \omega - \mu - i\delta} \right\}, \quad (9.24)$$

называемому „разложением Лемана“ для функции Грина. Спектральная функция обладает следующими важными свойствами:

а) $A^\pm(\mathbf{k}, \omega) \geq 0$ и действительны,

$$\text{б) } \int_0^\infty [A^+(\mathbf{k}, \omega) + A^-(\mathbf{k}, \omega)] d\omega = 1 \quad (\text{„правило сумм“}). \quad (9.25)$$

Спектральная функция для свободных частиц есть δ -функция

$$A_0^\pm(\mathbf{k}, \omega) = \theta_{\pm \varepsilon_k \mp \varepsilon_F} \delta(\pm \omega - \varepsilon_k + \mu). \quad (9.26)$$

Подставив это выражение в соотношения (9.22) и (9.24), мы получим $G_0(\mathbf{k}, t)$ и $G_0(\mathbf{k}, \omega)$. Для квазичастиц δ -функция размывается и приобретает лоренцевскую форму

$$A_{\text{квазичаст}}^\pm(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\theta_{\pm \varepsilon'_k \mp \varepsilon'_F}}{\pi} \frac{(1/\tau_k) Z_k}{[\omega \mp (\varepsilon'_k - \mu)]^2 + \left(\frac{1}{\tau_k}\right)^2} + D(\mathbf{k}, \omega), \quad (9.27)$$

где $D(\mathbf{k}, \omega)$ — поправка, необходимая для того, чтобы удовлетворялось правило сумм. Подстановка этого выражения в соотношения (9.22) и (9.24) сразу дает функцию Грина для квазичастиц, (8.36); см. [60].

Одна из основных причин популярности спектральных функций состоит в следующем. Предположим, что мы приближенно вычисляем $G(\mathbf{k}, \omega)$ путем частичного суммирования некоторого класса диаграмм. Вообще говоря, приближенное выражение $G(\mathbf{k}, \omega)$ может обладать и неправильными „аналитическими свойствами“, в результате чего, пользуясь им для вычисления некоторых свойств системы, мы можем получить физически бессмысленный результат. Выход из положения состоит в том, чтобы использовать приближенное значение функции Грина $G(\mathbf{k}, \omega)$ для вычисления спектральной функции A^\pm :

$$\begin{aligned} A^+(\mathbf{k}, \omega - \mu) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im } G(\mathbf{k}, \omega), & \omega > \mu, \\ A^-(\mathbf{k}, \mu - \omega) &= +\frac{1}{\pi} \text{Im } G(\mathbf{k}, \omega), & \omega < \mu. \end{aligned} \quad (9.28)$$

Если функция A^\pm удовлетворяет условию „а“ из (9.25), то, подставив ее в соотношение (9.22) или (9.24), мы получим функцию Грина с заведомо правильными аналитическими свойствами (так как к ним имеет отношение только условие „а“). Если не выполняется правило „б“ то, как и в случае (9.27), можно добавить поправочное слагаемое. Другое дело, как его найти фактически [64].

§ 4. Вывод разложения для функции Грина в задаче многих тел

Разложение функции Грина в ряд теории возмущений в гл. 3 и 4 было получено в основном по аналогии со случаем детского бильярда. Не грех бы позаботиться, однако, чтобы апелляция только к мартышкиным аргументам не привела нас к мысли о том, что диаграммная техника есть либо а) забава для детского сада, либо б) продукт черной магии. С этой целью мы наметим идею строгого доказательства такого разложения для случая одной частицы, описанного в § 4 гл. 3. Доказательство в многочастичном случае значительно более сложно. Оно, однако, не необходимо для понимания остального материала книги и потому отнесено в приложения II—VII. (Мы будем время от времени ссылаться на некоторые их части, которые могут быть прочитаны отдельно.) набросок такого доказательства содержится в приложении II, где показано, как полное диаграммное разложение вытекает из зависящего от времени уравнения Шредингера.

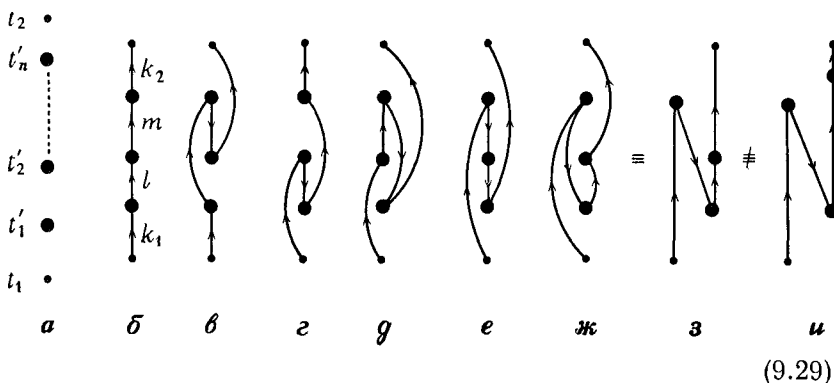
Вероятно, большинство читателей, заглянувших сейчас в это приложение, найдут его настолько непривлекательным, что удовлетворятся мартышкиной трактовкой.

§ 5. Топология диаграмм

Чтобы развить общие методы работы с диаграммами, надо иметь способ систематического построения всех диаграмм n -го порядка. К нему мы сейчас и обратимся.

Начнем с простейшей ситуации, например когда мы имеем N фермионов во внешнем поле. Ряд для функции Грина G в этом случае имеет вид (4.34). Чтобы получить все диаграммы n -го порядка, изобразим n жирных „вершин“ в вертикальном ряду и пометим их индексами t'_1, \dots, t'_n , кроме того, изобразим две тощие „внешние точки“ и пометим их индексами t_1 и t_2 [см. (9.29), диаграмма a]. Соединим теперь точки всеми возможными „топологически различными“ (в смысле Голдстоуна — см. ниже) связанными способами так, чтобы в каждую точку входило и из каждой точки выходило по одной линии. Для случая $n=3$ это показано в (9.29),

диаграммы б — ж¹⁾:



[Термин „связанный“ означает, что диаграмма состоит только из одного куска. См. приложение VII, (VII. 1).]

Под „топологически различными“ способами (в смысле Голдстоуна) мы понимаем следующее. Представим себе точки в виде кругляшков из затвердевшей жевательной резинки, и пусть они соединены друг с другом резиновыми шнурами с прикрепленными к ним головками стрелок. Тогда две диаграммы топологически эквивалентны (в смысле Голдстоуна), если одну из них можно получить из другой путем деформации без изменения порядка точек по вертикали. В противном случае диаграммы называются различными. Например, диаграммы ж и з эквивалентны, и обе отличаются от диаграммы и. Последняя совпадает с г. Очевидно, имеется $n!$ диаграмм n -го порядка²⁾. Отметим, что „все топологически различные способы соединения n точек“ отвечают „всем физически различным путям, по которым частица может пройти сквозь систему, рассеявшись n раз“.

Этот „метод Голдстоуна“ можно значительно упростить, если направленной линией сопоставлять полную функцию Грина $G = G^+ + G^-$ [см. (8.31) и (9.6)], а не отдельно G^+ или G^- . Это соответствует „методу Фейнмана“. Тогда в сум-

1) В (9.29) показаны только те диаграммы, для которых $t_1 < t'_1$ и $t_2 > t'_3$. Возможны также и другие диаграммы, для которых $t'_1 < t_1 < t'_3$ и (или) $t'_1 < t_2 < t'_3$

2) Это верно только для $t_1 < t'_1, \dots, t'_n < t_2$. Их будет значительно больше, если мы включим случаи $t'_1 < t_1 < t'_n$ и $t'_1 < t_2 < t'_n$

мах по промежуточным состояниям, нумеруемым, скажем, индексом l , мы автоматически получаем G_0^+ для $l > k_F$ и G_0^- для $l < k_F$. Таким образом, больше нет необходимости рисовать дырочные линии, ибо любая направленная линия есть линия *частицы* при $l > k_F$ и линия *дырки* при $l < k_F$. Более того, не имеет значения и временной порядок точек. Следовательно, ряд (4.34) принимает вид

$$\begin{array}{c} k_2 \\ \parallel \\ \text{---} \\ \parallel \\ k_1 \end{array} = \begin{array}{c} k_2 \\ \uparrow \\ \text{---} \\ \downarrow \\ k_1 \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ \bullet \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \\ \uparrow \end{array} + \dots \quad (9.30)$$

Другими словами, диаграммы Голдстоуна упорядочены во времени, а диаграммы Фейнмана не упорядочены¹⁾.

Это позволяет сэкономить массу художественной работы — одна трехвершинная диаграмма (9.30), например, топологически эквивалентна (в фейнмановском смысле) шести диаграммам *б — ж* в (9.29)²⁾! Правило построения диаграммы n -го порядка становится теперь тривиальным — просто рисуется n вершин и две внешние точки и через них проводится вертикальная линия. Уравнение (9.30) можно записать в виде (опуская для краткости аргумент ω)

$$\begin{aligned} G(k_2, k_1) &= \delta_{k_1 k_2} G_0(k_1) + G_0(k_1) V_{k_2 k_1} G_0(k_2) + \\ &+ \sum_{\text{по всем } q} G_0(k_1) V_{q k_1} G_0(q) V_{k_2 q} G_0(k_2) + \dots \quad (9.31) \end{aligned}$$

Построение диаграмм в случае взаимодействующих фермионов в отсутствие внешнего поля [см. (4.63)] значительно сложнее. Чтобы получить все диаграммы n -го порядка, нарисуем n извилистых линий с двумя вершинами на обоих концах каждой из них и две внешние точки

$$\left. \begin{array}{c} \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \vdots \\ \text{~~~~~} \end{array} \right\} n \quad (9.32)$$

¹⁾ В методе Голдстоуна интегрирование по времени проводится по интервалам, допускаемым временным порядком в диаграмме, в то время как в методе Фейнмана оно проводится в интервале от $-\infty(1-i\eta)$ до $+\infty(1-i\eta)$ (см. примечание на стр. 84).

²⁾ Плюс все диаграммы с иным порядком следования времен, о которых упоминалось в примечаниях на стр. 182.

Соединим все точки друг с другом направленными линиями всеми связанными, топологически различными (в смысле Голдстоуна) способами так, что каждая вершина будет иметь одну входящую и одну выходящую линию и в одну внешнюю точку будет входить, а из другой выходить одна линия. Заметим, что, согласно (4.60), деформированные диаграммы типа (4.61) не являются топологически различными в смысле Голдстоуна и рисовать следует только одну из них.

Рассмотрим для иллюстрации поправки к функции Грина второго порядка. Число различных связанных диаграмм, возникающих в соответствии с правилом (9.32), даже в столь низком порядке ослепительно или, может быть, подавляюще в зависимости от того, как вы смотрите на вещи — эстетически или практически. Несколько типичных диаграмм имеют вид

G_2 -й порядок =

$$\begin{aligned}
 &= \text{a} + \text{б} + \text{в} + \text{г} + \dots \\
 &+ \text{д} + \text{е} + \text{ж} + \dots + \text{з} + \dots \\
 &+ \text{и} + \dots + \text{к} + \text{л} + \text{м} + \dots \quad (9.33)
 \end{aligned}$$

Проведя некоторое время наедине с этими сюрреалистическими картинками, нетрудно сообразить, что многие из них можно отбросить. Прежде всего вследствие закона сохранения импульса диаграммы б, г, з, и, к, м содержат *частицу* и дырку с одинаковыми импульсами. Однако это невозможно

в силу (7.72). Таким образом, этих диаграмм нет. (Такие диаграммы называют „аномальными“ или „не сохраняющими импульса“. Они дают вклад, если система неоднородна, например в присутствии внешнего поля, или находится при конечной температуре.) Далее, если мы примем метод Фейнмана [см. (9.30)], в котором каждой линии соответствует полная функция Грина G и упорядочение во времени значения не имеет, то $e \equiv d$, $ж \equiv л$. Следовательно, из всего ряда (9.33) „выживают“ только следующие диаграммы:

$G_{2\text{-й порядок}} =$

1 2 3 4 5 6

(9.34)

или

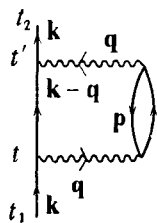
$G_{2\text{-й порядок}} =$

(9.35)

При этом последний набор представляет собой не более чем традиционный способ изображения диаграмм (получаемый путем изготовления их из резиновых шнурков с последующим растягиванием вверх и вниз так, чтобы главная линия выпрямилась). Ясно, что равенства (9.34) и (9.35) топологически эквивалентны в смысле Фейнмана. Отметим, что в методе Фейнмана направление стрелок не определяет линию частицы или линию дырки, а указывает просто направление импульса. Обратите внимание на важную роль стрелок! Именно из-за них диаграммы 2 и 3 в наборе (9.34) оказываются топологически различными!


Вычислим типичную диаграмму второго порядка с помощью метода Фейнмана. Используя табл. 7, мы получаем в (k, t) -пространстве [относительно пределов интегрирования

по времени см. абзац (мелкий шрифт), следующий за формулой (4.37)]

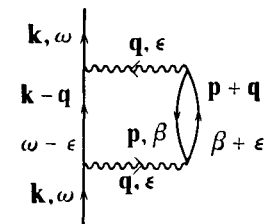


$$\begin{aligned}
 &= (-1) \sum_{q, p} \int_{-\infty}^{+\infty} dt dt' [iG_0(\mathbf{k}, t-t_1)] [-iV_q] \times \\
 &\times [iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, t'-t)] [iG_0(\mathbf{p}, t-t')] \times \\
 &\times [iG_0(\mathbf{p}+\mathbf{q}, t'-t)] [-iV_q] [iG_0(\mathbf{k}, t_2-t')].
 \end{aligned} \tag{9.36}$$

Отметим, что порядок времен в функции Грина G_0 обычный: время у конца направленной линии минус время у начала. Напомним, что выражение (9.36) представляет собой на самом деле две объединенные диаграммы d и e из (9.33).

Множитель (-1) появился из-за присутствия фермионной петли . Фермионные петли были определены сразу же после выражения (4.56). Например, диаграммы $a, б, з$ в (9.33) имеют по две петли, диаграммы $в, г, д, е, и, к$ — по одной, а другие — ни одной. (См. конец приложения VII.)

Фурье-трансформанта выражения (9.36) имеет вид



$$\begin{aligned}
 &= (-1) [iG_0(\mathbf{k}, \omega)]^2 \sum_{p, q} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \frac{d\beta}{2\pi} \times \\
 &\times [iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\epsilon)] [iG_0(\mathbf{p}, \beta)] [iG_0(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \beta+\epsilon)] [-iV_q]^2.
 \end{aligned} \tag{9.37}$$

Видно, что энергетические параметры ω, ϵ, β и т. д. сохраняются в вершинах так же, как и импульсы. Это связано с появлением в результате интегрирования δ -функций типа $2\pi\delta(\omega' - \omega)$ из формулы (2.23).

Отметим, что энергетический параметр следует сопоставлять как функции Грина, так и линии взаимодействия. В некоторых случаях элемент V_q на самом деле зависит от ϵ (это „частотно зависящее“ или — в (\mathbf{q}, t) -пространстве — „запаздывающее“ взаимодействие). Наконец, обратим внимание на то, что необходимо производить интегрирование или сум-

мирование по всем промежуточным импульсам и энергиям, причем слово „промежуточный“ означает исключение из сумм и интегралов тех частот и импульсов, которые совпадают с значениями \mathbf{k} и ω на входящей или выходящей линии.

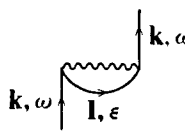
И еще одно замечание. Мы можем избежать рассмотрения „не распространяющихся“ линий как специального случая, что было сделано в табл. 7, используя следующее соглашение:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} iG_0(\mathbf{k}, \varepsilon) = -1, \quad k < k_F,$$

$$= 0, \quad k > k_F. \quad (9.38)$$

(На самом деле этот интеграл равен $-\frac{1}{2}$ для $k < k_F$ и $+\frac{1}{2}$ для $k > k_F$. Альтернативно можно было бы ввести в определение G_0 специальный фазовый множитель, как это описано в приложении IX. Лицам, которых такие соглашения травмируют, рекомендуем по-прежнему рассматривать не распространяющиеся линии как особый случай!)

Таким образом, например,



$$= [iG_0(\mathbf{k}, \omega)]^2 \sum_l \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} [-iV_{lkk l}] [iG_0(l, \varepsilon)] =$$

$$= [iG_0(\mathbf{k}, \omega)]^2 \sum_{l < k_F} (-iV_{lkk l}) (-1), \quad (9.39)$$

что совпадает с результатом (4.62).

§ 6. Правила построения диаграмм для одночастичной функции Грина

Мы достигли теперь момента, когда можно уже сформулировать в окончательной форме правила построения и вычисления диаграмм того типа, который будет использован в двух последующих главах. Эти диаграммы описывают систему взаимодействующих фермионов в отсутствие внешних полей и всегда будут строиться в (\mathbf{k}, ω) -пространстве с помощью метода Фейнмана. Искомые правила состоят в следующем:

1. Для получения диаграммы n -го порядка строим n извилистых линий с вершинными точками и две внешние точки, как это показано в (9.32).

2. Соединяем все вершины и внешние точки друг с другом направленными линиями всеми связанными, топологи-

чески различными (в смысле Фейнмана) способами. Каждой вершине должна отвечать одна входящая и одна выходящая линии; в одну внешнюю точку должна входить, а из другой выходить одна линия. Две диаграммы топологически различны, если, будучи сделаны из резиновых шнурков, они не могут быть переведены друг в друга путем деформации.





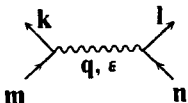
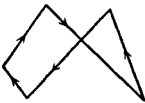
3. Каждой линии, в том числе и волнистой, сопоставляем импульс k (это есть сокращение для совокупности k, σ , где σ — спин) и энергетический параметр ω , так что сумма импульсов (и энергетических параметров) всех входящих в вершину линий равна соответствующей сумме всех выходящих линий.

Отбрасываем все „аномальные“ или „не сохраняющие импульсы“ диаграммы, т. е. те, которые содержат электрон и дырку в одном и том же состоянии.

Применение этих правил приводит к следующему ряду:

(9.40)

4. Вычисляем диаграммы, пользуясь словарем табл. 10

Элемент диаграммы	Множитель	
\mathbf{k}, ω  или \mathbf{k}, ω 	$iG(\mathbf{k}, \omega)$	
\mathbf{k}, ω  или \mathbf{k}, ω 	$iG_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + i\delta_{\mathbf{k}}}, \quad \begin{cases} \delta_{k > k_F} = +\delta, \\ \delta_{k < k_F} = -\delta, \end{cases}$ <p>причем</p> $\int \frac{d\omega}{2\pi} [iG_0(\mathbf{k}, \omega)] = \begin{cases} -\theta_{k_F - k} \\ = -1, & k < k_F \\ = 0, & k > k_F \end{cases}$	
	$-iV_{klmn}$ или $-iV_q$ [для зависящего от времени взаимодействия следует брать $V_{klmn}(\epsilon)$ или $V_q(\epsilon)$]	
Каждая фермионная петля	Пример:	
петля		-1
Каждый промежуточный энергетический параметр ω	$\int \frac{d\omega}{2\pi}$	
Каждый промежуточный импульс \mathbf{k}	$\sum_{\mathbf{k}}$ или $\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$ (для $\Omega = 1$) (включая и суммирование по спинам)	

Примеры применения этих правил будут даны в следующих главах. Прежде чем перейти к ним, не лишне указать, что не все строят диаграммы так, как мы. Некоторые „графологи“ используют сокращенные диаграммы, в которых волнистые линии взаимодействия заменены точками или маленькими квадратиками. Например,

$$(9.41)$$

Отметим, что такая сокращенная диаграмма заменяет несколько диаграмм Фейнмана. (См. [67] или [29] по поводу диаграмм с точками и [1] касательно диаграмм с квадратами.)

§ 7. Модифицированный формализм функций Грина, в котором используется химический потенциал μ

Только что описанный формализм может оказаться несколько неудобным при реальных вычислениях, так как, если не принять особых мер предосторожности, можно получить для функции Грина G приближения, которые дают неправильное число частиц в системе.

Чтобы понять это, установим связь между функцией Грина G и полным числом частиц N . Последнее есть среднее по основному состоянию системы с взаимодействием от оператора полного числа частиц $2 \sum_k c_k^\dagger c_k$ (множитель 2 обусловлен спином)

$$N = \langle \Psi_0 | 2 \sum_k c_k^\dagger c_k | \Psi_0 \rangle = 2 \sum_k \langle \Psi_0 | c_k^\dagger c_k | \Psi_0 \rangle. \quad (9.42)$$

Величина, стоящая под знаком суммы, легко выражается через $G(k_2, k_1, t_2 - t_1)$, если в формуле (9.6) положить $t_2 = t$, $t_1 = 0$, $k_1 = k_2 = \mathbf{k}$ и устремить t к нулю слева. В результате получим искомое соотношение

$$N = 2 \sum_k (-i) \lim_{t \rightarrow 0^-} G(\mathbf{k}, t) = -2i \lim_{t \rightarrow 0^-} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} G(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega t}. \quad (9.43)$$

Предположим теперь, что некоторая рассматриваемая система состоит из N_0 частиц. Представим себе, что путем

частичного суммирования какого-то класса диаграмм в (9.40) мы получили приближенное выражение для G ; подставим его в соотношение (9.43), дабы проверить, выполняется ли равенство $N = N_0$. Ясно, что приближенная функция Грина будет зависеть от N_0 . Действительно, она выражается через „свободную“ функцию Грина G_0 , которая зависит от k_F ; последняя величина в свою очередь связана с N_0 соотношением

$$N_0 = 2 \sum_{k < k_F} 1 = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d^3\mathbf{k} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}, \text{ или } k_F = (3\pi^2 N_0)^{1/3}. \quad (9.44)$$

Отметим, что энергия Ферми

$$\varepsilon_F = \frac{k_F^2}{2m} = \frac{(3\pi^2 N_0)^{2/3}}{2m}. \quad (9.45)$$

Таким образом, N будет функцией от N_0 . Однако в силу того, что выражение для функции G было приближенным, нет никакой гарантии, что N совпадет с N_0 .

Этой трудности можно избежать, не изменяя развитого выше формализма, либо с помощью обсуждавшегося в § 3 метода спектральных функций, либо с помощью описанной в § 1 гл. 11 самосогласованной теории возмущений. Оказывается, однако, что гораздо проще несколько видоизменить развитый выше формализм. Модификация состоит в использовании „большого канонического ансамбля“ при нулевой температуре (случай конечных температур описан в гл. 14). Дело сводится к тому, что мы больше не рассматриваем систему как изолированную с определенным числом частиц N_0 . Вместо этого приводим ее в контакт с резервуаром частиц, разрешив ей терять или приобретать частицы. Таким образом, на протяжении всех вычислений число частиц N есть величина переменная. Химический потенциал системы μ [см. (9.23)] фиксирован, но неизвестен. Его значение находится в конце всех вычислений из условия $N = N_0$. В этом случае модифицированный гамильтониан имеет вид [48]

$$H' = H - \mu N = H'_0 + H_1,$$

где

$$\begin{aligned} H'_0 &= \sum_k (\varepsilon_k - \mu) c_k^\dagger c_k, \\ H_1 &= \frac{1}{2} \sum_{klmn} V_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n, \end{aligned} \quad (9.46)$$

а N — оператор полного числа частиц.

Основное состояние модифицированного невозмущенного гамильтониана H'_0 находят, подбирая число частиц и способ заполнения уровней так, чтобы минимизировать энергию. Легко видеть, что это приводит к требованию, чтобы все уровни вплоть до $\varepsilon_k = \mu$, т. е. до $k_F^\mu = \sqrt{2m\mu}$, были заполнены. Соответствующее число частиц есть $N = (3\pi^2)^{-1} (2m\mu)^{3/2}$. Одночастичная функция Грина, соответствующая гамильтониану H'_0 , есть

$$G_0^\mu(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) + i\delta_k^\mu}, \quad \delta_k^\mu = \begin{cases} 1 & \text{для } \varepsilon_k > \mu, \\ -1 & \text{для } \varepsilon_k < \mu. \end{cases} \quad (9.47)$$

Все правила построения диаграмм остаются такими же, какие указаны в табл. 10, с той лишь разницей, что функцию G_0 теперь следует заменить на G_0^μ .

В указанном методе приближенная функция Грина зависит от μ , так что после подстановки ее в выражение (9.43) функцией от μ становится и N . Определив теперь величину μ из уравнения

$$N(\mu) = N_0, \quad (9.48)$$

мы можем быть гарантированы, что получим правильное число частиц. [Отметим, что найденное таким путем значение μ зависит от энергии взаимодействия H_1 . В системах без взаимодействия ($H_1 = 0$) точная функция Грина G равна просто G_0^μ , и, используя соотношения (9.47), (9.43) и (9.48), мы получаем

$$N(\mu) = \frac{(k_F^\mu)^3}{3\pi^2} = \frac{(2m\mu)^{3/2}}{3\pi^2} = N_0. \quad (9.49)$$

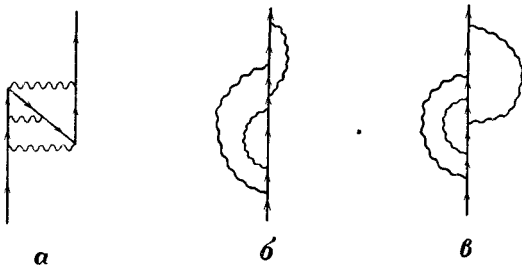
Таким образом, химический потенциал μ равен ε_F — энергии Ферми (в системе без взаимодействия), определяемой равенством (9.45).]

Литература для дальнейшего чтения:

- Пайнс [52],
 Шульц [60],
 Шриффер [58],
 Таулес [64],
 Таулес [65],
 Браун [11],
 Изли [15],
 Нозьер [48],
 Андерсон [2],
 Абрикосов, Горьков, Дзялошинский [1],
 Клейн [35],
 Киржниц [69].

Упражнения ●

1. Найдите $T \{c_k(t_1) c_l^\dagger(t_2) c_m^\dagger(t_3)\}$, когда $t_2 > t_3$ и $t_3 = t_1$.
2. Вычислите дырочную часть функции Грина (9.6) в отсутствие взаимодействия и покажите, что она равна дырочной части выражения (8.34) [используйте соотношения типа (9.15)–(9.20)].
3. Проверьте, что если соотношение (9.26) подставить в (9.22) и (9.24), то получатся правильные выражения для функций Грина свободной частицы.
4. Покажите, что диаграммы k и m в (9.33) содержат частицу и дырку в одном и том же состоянии.
5. Какие из приведенных диаграмм топологически эквивалентны в смысле Фейнмана?



6. Используя индексы, явно учитывающие сохранение импульса, выпишите в (\mathbf{k}, ω) -пространстве фейнмановскую диаграмму $ж$ в (9.33).
7. Проверьте соотношение (9.20а).

УРАВНЕНИЕ ДАЙСОНА, ПЕРЕНОРМИРОВКА, ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ФАЗ И ЛЕСТНИЧНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

§ 1. Общие методы частичного суммирования диаграмм

Как мы уже отмечали, обычная теория возмущений оказывается беспомощной, сталкиваясь с сильными, сингулярными потенциалами взаимодействия в системах многих частиц. В таких типичных случаях, как электронный газ или ядерная материя, почти все слагаемые в разложении функции Грина или вакуумной амплитуды оказываются расходящимися. Поэтому, желая получить сколько-нибудь разумный результат, мы вынуждены выходить за рамки обычной теории возмущений и использовать метод частичного суммирования диаграмм. В первой половине книги мы уже встречались с простыми примерами применения этого метода.

В настоящей и следующей главах мы собираемся раскрыть некоторые общие трюки частичного суммирования, которые стали непременной частью большинства работ, использующих аппарат функций Грина. Эти трюки могут произвести на непосвященных довольно обескураживающее впечатление, поскольку бесконечное число бесконечных рядов диаграмм появляется только для того, чтобы затем улетучиться, как пар, пока не останутся только две диаграммы! Однако, несмотря на всю загадочность, этот метод чрезвычайно прост — дело сводится к суммированию геометрических прогрессий, — и только сопутствующие заклинания придают всему этому мистический характер.

Общие методы частичного суммирования для вычисления функции Грина ферми-системы с взаимодействием в отсутствие внешних полей перечислены в табл. 11.

Процесс суммирования, указанный в п. 2—4 табл. 11, называют часто „перенормировкой“ [см. (2.2)]. Например, в результате перенормировки взаимодействия возникает более простой ряд, в котором все линии взаимодействия уже не содержат никаких „поляризационных частей“, а все они

Общий тип суммируемых диаграмм	Результат
1. Все диаграммы, содержащие повторения неприводимых собственнно-энергетических частей. (Суммирование полное.)	Уравнение Дайсона
2. Все диаграммы с «поляризационными частями», вставленными в линии взаимодействия	«Одетые», «эффективные» или «перенормированные» взаимодействия
3. Все диаграммы с «собственно-энергетическими частями», вставленными в линии свободных частиц или дырок	«Одетые» или «перенормированные» линии частиц или дырок (самосогласованная теория возмущений)
4. Все диаграммы с «неприводимыми вершинными частями», вставленными на место голых вершин	Одетые вершины

одетые. То же самое относится и к линиям, описывающим частицы, и к вершинам.



С чисто внешней точки зрения наиболее удивительный результат такого рода суммирований состоит в колоссальном упрощении вида ряда. Не следует думать, однако, что это просто „искусство для искусства“. Суть дела в том, что суммирование бесконечного ряда расходящихся слагаемых приводит к новому ряду, каждый член которого уже конечен. Мы увидим этот замечательный эффект при изучении электронного газа высокой плотности.

Другая существенная особенность частичного суммирования состоит в том, что результат его поддается непосредственно физической интерпретации. Например, одеванию взаимодействия отвечает просто его экранирование, а одетая одночастичная линия соответствует квазичастице.

Следует, наконец, отметить, что табл. 11 выглядит несколько более впечатляюще, чем это есть на самом деле. Именно, на практике, слова „все диаграммы“ в каждом случае приходится заменять на „один или два типа диаграмм“. В некоторых предельных случаях это приводит к превосходным приближениям. Например, в электронном газе высокой плотности основной вклад дают „кольцевые“ диаграммы („приближение случайных фаз“, или RPA), в то время как в фермионном газе низкой плотности, подобном ядерной материи, основной вклад обусловлен „лестничными“

диаграммами. И даже не в предельных случаях суммирование одного или двух типов диаграмм полезно, поскольку оно дает возможность избежать расходимостей.

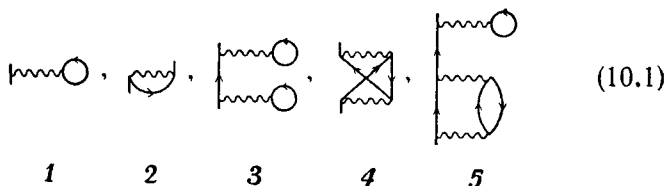
§ 2. Уравнение Дайсона

Техника частичного суммирования, использованная при получении простых приближений Хартри (4.67) и Хартри — Фока (4.76), может быть обобщена для вывода чрезвычайно удобного точного выражения для функции Грина, известного под именем уравнения Дайсона. В указанных приближенных методах частичное суммирование оказалось возможным благодаря тому, что мы имели дело с повторением простых частей диаграмм, подобных  и , нанизанных на основную направленную (k, ω) -линию, как жемчужины в ожерелье. Рассмотрение полной функции Грина (9.40) показывает, что она представляет собой ожерелье из повторяющихся простых частей и может быть просуммирована подобным образом.

Выясним более точно, что мы понимаем под „простой частью“, или, как ее называют на модном в литературе языке, „собственно-энергетической частью“, или „неприводимой собственно-энергетической частью“¹⁾. Введем сначала определения.

Собственно-энергетическая часть — любая диаграмма без внешних (т. е. входящих и выходящих) линий, которую можно вставить в линию частицы (или дырки).

Примеры:



Два маленьких обрубка линий в каждой из этих диаграмм показывают, где именно к ним подсоединяется линия частицы. Эти диаграммы, как видно в (9.40), вставлены различными способами в линию частицы.

Неприводимая собственно-энергетическая часть — собственно-энергетическая часть, которую нельзя разбить на две

¹⁾ В литературе используется также термин „массовый оператор“. — *Прим перев.*

несвязанные собственно-энергетические части путем удаления одной линии частицы или дырки.

Примеры:

$$\text{---} \circ \text{---} \cdot \text{---} \cup \text{---} \cdot \text{---} \text{---} \text{---} \cdot \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \cdot \dots \quad (10.2)$$

Части, которые можно разбить на две указанным способом — подобные диаграммам 3 и 5 в (10.1), — называются „приводимыми“.

В случае (4.67) мы суммировали все диаграммы, содержащие повторения собственно-энергетической части $\text{---} \circ \text{---}$, в результате чего получилось

$$\text{---} \parallel \text{---} \approx \frac{1}{\text{---} \uparrow^{-1} - \text{---} \circ \text{---}} \quad (10.3)$$

В выражении (4.76) суммирование проводилось с учетом двух неприводимых частей $\text{---} \circ \text{---}$ и $\text{---} \cup \text{---}$, что дало

$$\text{---} \parallel \text{---} \approx \frac{1}{\text{---} \uparrow^{-1} - (\text{---} \circ \text{---} + \text{---} \cup \text{---})} \quad (10.4)$$

Подобным же образом можно суммировать и с учетом трех неприводимых частей $\text{---} \circ \text{---}$, $\text{---} \cup \text{---}$ и $\text{---} \text{---} \text{---}$:

$$\begin{aligned} \text{---} \parallel \text{---} &\approx \text{---} \uparrow + \text{---} \uparrow \text{---} \circ \text{---} + \text{---} \uparrow \text{---} \cup \text{---} + \text{---} \uparrow \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \uparrow \text{---} \circ \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \uparrow \text{---} \cup \text{---} \text{---} \text{---} + \dots + \text{---} \uparrow \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \uparrow \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \dots = \\ &= \text{---} \uparrow \times \left[1 + \text{---} \uparrow \times (\text{---} \circ \text{---} + \text{---} \cup \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---}) + \text{---} \uparrow^2 \times (\text{---} \circ \text{---} + \text{---} \cup \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---})^2 + \dots \right] = \\ &= \frac{1}{\text{---} \uparrow^{-1} - (\text{---} \circ \text{---} + \text{---} \cup \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---})} \quad (10.5) \end{aligned}$$

Наконец, в общем случае можно просуммировать по всем повторениям *всех* неприводимых собственно-энергетических частей:

$$\begin{aligned}
 \parallel &= \parallel + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \dots = \\
 &= \parallel \times \left[1 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \right] + \\
 &\quad + \parallel^2 \times \left(\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \right)^2 + \dots \Big] = \\
 &= \frac{1}{\parallel^{-1} - \left(\text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \right)}, \tag{10.6}
 \end{aligned}$$

или

$$\parallel = \frac{1}{\parallel^{-1} - \textcircled{\Sigma}} \tag{10.7}$$

Здесь $\textcircled{\Sigma}$ есть сумма всех неприводимых собственно-энергетических частей — *полная неприводимая собственно-энергетическая часть* или *массовый оператор*:

$$\textcircled{\Sigma} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \dots \tag{10.8}$$

В переводе на язык функций, согласно табл. 10, это означает

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega) + i\delta_{\mathbf{k}}}, \tag{10.9}$$

где

$$-i\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \equiv \textcircled{\Sigma} \tag{10.10}$$

В системе без взаимодействия $\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = 0$. Отметим, что при суммировании диаграмм (10.3)–(10.6) необходимо было ограничиться суммой по повторениям *неприводимых собственно-энергетических* частей. Если бы мы суммировали по повторениям *приводимых* частей, то каждая диаграмма учитывалась бы дважды в силу того, что, как это можно усмотреть из диаграмм 3 и 5 из (10.1), приводимые части сами содержат повторения.

Соотношение (10.7) или (10.9) называется уравнением Дайсона. Это есть основное уравнение, из которого исходят, вычисляя функцию Грина. Оно точное, потому что все входящие в (9.40) диаграммы получаются либо из неприводимых собственно-энергетических частей, либо из повторений неприводимых собственно-энергетических частей, и все они были учтены нами при суммировании. Таким образом, суммирование здесь не частичное, а полное. Но не давайте себя одурачить всеми этими рассуждениями и не думайте, что если выражение (10.7) точное, то это и есть решение задачи! Все, что было сделано — это проведено суммирование по *повторениям* неприводимой собственно-энергетической части; сумма же (10.8) по всем неприводимым частям по-прежнему неизвестна, и, к несчастью, вычислить ее в общем случае невозможно. Можно, однако, найти ее с различной степенью

точности. Например, в низшем порядке для Σ мы получаем приближение Хартри — Фока

$$\Sigma \approx \text{---} \circ + \text{---} \cup \text{---} \quad (10.11)$$

Путем сравнения точного выражения для функции Грина (10.7) с приближением Хартри (10.3) или Хартри — Фока (10.4) легко установить физический смысл массового оператора $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$. По аналогии с соображениями, приводившимися по поводу соотношения (4.73), можно говорить, что выражение $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ описывает обобщенное „эффективное поле“, или „эффективный потенциал“, который действует на частицу с импульсом \mathbf{k} вследствие взаимодействия ее со всеми остальными частицами системы. Это поле, конечно, значительно сложнее хартри-фоковского из-за своей частотной зависимости, отражающей движение облака, окружающего квази-частицу [см. второй абзац после (4.95)].

Важно заметить, что уравнение Дайсона в форме (10.7) справедливо только в специальном случае системы в отсут-

стве внешних полей (который мы и будем главным образом рассматривать); при этом диаграммы можно вычислять в (\mathbf{k}, ω) -пространстве. Существует, однако, и более общая форма уравнения Дайсона, содержащая все то, что находится и в разложении (9.40):

$$\text{||} \uparrow = \uparrow + \text{O}(\Sigma) \quad (10.12)$$

Справедливость этого уравнения можно доказать с помощью итераций

$$\begin{aligned} \text{||} \uparrow &= \uparrow + \text{O}(\Sigma) = \uparrow + \text{O}(\Sigma) + \text{O}(\Sigma) \text{O}(\Sigma) = \uparrow + \text{O}(\Sigma) + \text{O}(\Sigma) \text{O}(\Sigma) + \text{O}(\Sigma) \text{O}(\Sigma) \text{O}(\Sigma) + \dots \\ &= \uparrow + \text{O}(\Sigma) + \text{O}(\Sigma) \text{O}(\Sigma) + \text{O}(\Sigma) \text{O}(\Sigma) \text{O}(\Sigma) + \dots \end{aligned} \quad (10.13)$$

Уравнение (10.12) сводится к (10.7) в указанном выше специальном случае пространственно однородной системы. Действительно, тогда вклад от каждой диаграммы дается просто произведением величин, отвечающих каждой из составляющих ее частей. Соответственно

$$\text{||} \uparrow = \uparrow + \text{||} \uparrow \times \text{O}(\Sigma) \times \uparrow,$$

или

$$G(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) + G(\mathbf{k}, \omega) \Sigma(\mathbf{k}, \omega) G_0(\mathbf{k}, \omega), \quad (10.14)$$

что и приводит к выражению (10.7) или к формуле (10.9). Что же касается уравнения (10.12), то оно справедливо и

тогда, когда диаграммы не факторизуются. Например, в (\mathbf{k}, t) -пространстве

$$\begin{array}{c} t_2 \\ \parallel \\ \mathbf{k} \\ \parallel \\ t_1 \end{array} = \begin{array}{c} t_2 \\ \parallel \\ \mathbf{k} \\ \parallel \\ t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{k} \uparrow t_2 \\ \circlearrowleft \Sigma \\ \mathbf{k} \downarrow t_1 \end{array}, \quad (10.15)$$

или

$$\begin{aligned}
 iG(\mathbf{k}, t_2 - t_1) &= iG_0(\mathbf{k}, t_2 - t_1) + \\
 &+ \int \int dt' dt'' iG_0(\mathbf{k}, t_2 - t'') (-i) \Sigma(\mathbf{k}, t'' - t') iG(\mathbf{k}, t' - t_1).
 \end{aligned} \quad (10.15a)$$

В отличие от алгебраического уравнения (10.14) последнее уравнение — интегральное.

Другим примером использования уравнения (10.12) служит случай системы во внешнем поле. Тогда

$$\begin{aligned}
 iG(k_2, k_1; \omega) &= iG_0(k_2, \omega) \delta_{k_2 k_1} + \\
 &+ \sum_{k, k'} iG_0(k_2, \omega) \delta_{k_2 k'} (-i) \Sigma(k', k; \omega) iG(k, k_1; \omega).
 \end{aligned} \quad (10.16)$$

Заметим, что, как уже говорилось на стр. 185, разложение (9.40) включает в себя и аномальные диаграммы. Если рассматривать $G(k_2, k_1; \omega)$ как элемент некоторой матрицы с индексами k_2 и k_1 , то понимаемое как матричное выражение (10.7) по-прежнему будет служить решением матричного уравнения (10.16) [39].

Собственно-энергетические диаграммы можно явно вычислять с помощью словаря табл. 10 [см., например, (10.29)]. Однако тогда нам придется выполнять все интегрирования по промежуточным энергетическим параметрам. Сокращенный метод, позволяющий этого избежать, требует нового словаря, подобного тому, который используется при вычислении энергии основного состояния (см. табл. 12). Эти правила описаны в книге [65] и в статьях [35, 42].

§ 3. Квазичастицы в ферми-системе низкой плотности (лестничное приближение)

В качестве примера вычисления собственно-энергетической части мы кратко опишем развитую Галицким (см. [52]¹⁾)

¹⁾ См. также [74]. — *Прим. ред.*

теорию систем частиц, взаимодействующих посредством короткодействующих сил отталкивания. Радиус действия сил обозначим через a , а среднее расстояние между ними — через r_0 . Слова „низкая плотность“ означают, что $a/r_0 \ll 1$. Подобная теория может качественно описывать ядерную материю (см. § 4 гл. 12), где $a/r_0 \sim \frac{1}{3}$, коль скоро мы пренебрегаем притягивающей частью ядерного взаимодействия. Она неприменима в случае He^3 , где $a/r_0 > 1$.

Оценим сначала порядок величин различных диаграмм для неприводимой собственно-энергетической части и выясним, какие из них наиболее существенны. Оказывается, что каждой дырочной линии соответствует множитель $k_F a$, так что

$$\begin{array}{l} \text{---} \circ \sim k_F a, \quad \text{---} \circ \text{---} \sim k_F a, \quad \text{---} \text{---} \text{---} \sim k_F a, \quad \text{---} \text{---} \text{---} \sim (k_F a)^2 \quad \text{и т. д.} \\ \text{---} \sim k_F a, \quad \text{---} \text{---} \sim k_F a, \quad \text{---} \text{---} \text{---} \sim k_F a \end{array}$$

(10.17)

Далее, поскольку плотность частиц n равна $\frac{1}{3} \pi^{-2} \times k_F^3$ [см. (9.44)], а $r_0^3 = 1/n$, то $k_F a \sim a/r_0$, т. е. $k_F a \ll 1$. Следовательно, в пределе низкой плотности наиболее существенны те диаграммы, которые содержат лишь одну дырочную линию. Таким образом, собственно-энергетическую часть приближенно можно представить в виде суммы

$$\begin{array}{l} \Sigma \approx \text{---} \circ + \text{---} \circ \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \dots \\ + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \dots \end{array} \quad (10.18)$$

Это и есть „лестничные диаграммы“.

Суммирование лестничных диаграмм можно выполнить с помощью так называемой t - или K -матрицы. Она опре-

делается рядом

$$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{K} \\ \diagdown \end{array} = \text{---} + \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} + \dots \quad (10.19)$$

K -матрица удовлетворяет уравнению, аналогичному уравнению Дайсона:

$$\begin{array}{c} \text{p}' \epsilon' \\ \diagup \\ \text{K} \\ \diagdown \\ \text{p} \epsilon \end{array} \begin{array}{c} \text{q} - \text{p}', \omega - \epsilon' \\ \text{---} \\ \text{q} - \text{p}, \omega - \epsilon \end{array} = \text{---} + \begin{array}{c} \text{p}' \epsilon' \\ \text{---} \\ \text{p}'' \epsilon'' \\ \diagup \\ \text{K} \\ \diagdown \\ \text{p} \epsilon \end{array} \begin{array}{c} \text{q} - \text{p}', \omega - \epsilon' \\ \text{---} \\ \text{q} - \text{p}'', \omega - \epsilon'' \\ \text{---} \\ \text{q} - \text{p}, \omega - \epsilon \end{array}, \quad (10.20)$$

в чем легко убедиться с помощью итераций [так же, как это делалось при выводе соотношения (10.13)]. Перевод графического уравнения (10.20) на язык функций дает

$$\begin{aligned} K(\mathbf{p}', \epsilon', \mathbf{p}, \epsilon; \mathbf{q}, \omega) &= \\ &= V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} + i \int \frac{d^3 \mathbf{p}'' d\epsilon''}{(2\pi)^4} V_{\mathbf{p}''-\mathbf{p}'} G_0(\mathbf{p}'', \epsilon'') G_0(\mathbf{q} - \mathbf{p}'', \omega - \epsilon'') \times \\ &\quad \times K(\mathbf{p}'', \epsilon'', \mathbf{p}, \epsilon; \mathbf{q}, \omega). \quad (10.21) \end{aligned}$$

[В некоторых простых случаях, например для потенциала парного взаимодействия (12.41) или для факторизующегося потенциала [58], K -матрицу можно вычислить явно.]

Подставляя выражение (10.19) в (10.18), получаем

$$\begin{array}{c} | \\ \Sigma \\ | \end{array} \approx \begin{array}{c} \diagup \\ \text{K} \\ \diagdown \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} \quad (10.22)$$

Найдем сначала приближенное выражение для K , воспользовавшись уравнением (10.21). Далее этот результат подставим в выражение (10.22) для Σ и полученный таким образом массовый оператор — в уравнение Дайсона. Все это приводит к функции Грина квазичастицы, имеющей вид (8.37) при k , близких к k_F ; при этом эффективная масса и время жизни квазичастицы вблизи поверхности Ферми оказываются равными

$$m^* = m \left[1 + \frac{8}{15\pi^2} (7 \ln 2 - 1) k_F^2 a^2 \right], \quad \frac{1}{\tau_k} = \frac{1}{\pi} k_F^2 a^2 (k - k_F)^2. \quad (10.23)$$

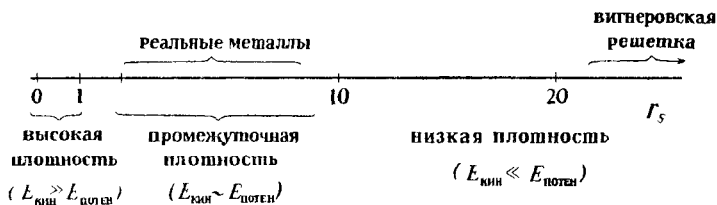
Заметим, что результат для времени жизни согласуется с соотношениями (8.30) и (8.29).

§ 4. Квазичастицы в электронном газе высокой плотности (приближение случайных фаз)

В § 9 гл. 4 мы ввели понятие об электронном газе — системе N электронов, движущихся на фоне размазанного положительного заряда. В голубых мечтах теоретика это есть модель металла. При нулевой температуре электронный газ характеризуется единственным безразмерным параметром r_s , который равен, грубо говоря, среднему расстоянию между электронами, измеренному в боровских радиусах. Более точно r_s определяется равенством

$$\frac{1}{n} \left(\frac{\text{см}^3}{\text{электрон}} \right) = \frac{4}{3} \pi (r_s a_0)^3, \quad (10.24)$$

где n есть плотность электронов, a_0 — боровский радиус. В соответствии с этим параметром значения n можно разбить на несколько характерных интервалов (фиг. 7).



Фиг. 7. Классификация электронного газа по плотности.

Пока что удалось успешно освоить только две области. Первая — это область высоких плотностей, где кинетическая энергия $E_{кин}$ электронов много больше потенциальной энергии их взаимодействия $E_{потен}$, так что последняя играет роль относительно слабого возмущения. Вторая область — это область малых плотностей, где потенциальная энергия уже настолько превосходит кинетическую, что система перестает быть пространственно однородной, и точки, в которых плотность электронного газа имеет максимумы, образуют объемно-центрированную кубическую решетку, называемую вигнеровской. Интересная промежуточная область, отвечающая реальным металлам ($r_s = 1,8 \div 5,6$), до сих пор устояла перед атакой теоретиков, хотя и здесь достигнут некоторый прогресс (см. [23, 26]). По выражению Монролла, здесь физик подобен мыши, откусывающей маленькие кусочки от края черствого куска сыра и не имеющей возможности добраться до свежей его сердцевины. В настоящем параграфе, исполь-

зую технику теории многих тел, мы рассмотрим левый край этого куска сыра, т. е. предел высокой плотности.

Гамильтониан системы электронов на фоне размазанного положительного заряда имеет вид

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n} V_{klmn} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n + H_{\text{фон}}^{\text{положительный}} + H_{\text{фон}}^{\text{электроны} - \text{положительный}}, \quad (10.25)$$

где матричные элементы $V_{klmn} = V_q$ определены равенством (7.71). Гамильтониан можно упростить, так как слагаемое с V_0 выпадает из второй суммы, сокращаясь с соответствующими слагаемыми в двух последних частях гамильтониана. Величину V_0 легко вычислить с помощью выражения (7.69). Опуская для простоты спиновые индексы, мы имеем

$$V_0 = V_{klkl} = \frac{1}{\Omega^2} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (10.26)$$

Таким образом, слагаемое с V_0 оказывается равным

$$\begin{aligned} \frac{V_0}{2} \sum_{kl} c_l^\dagger c_k^\dagger c_k c_l &= \frac{V_0}{2} \sum_{kl} c_l^\dagger c_l c_k^\dagger c_k - \frac{V_0}{2} \sum_k c_k^\dagger c_k = \\ &= \frac{V_0}{2} (N^2 - N) = \frac{1}{2} \frac{N^2 e^2}{\Omega^2} \int \frac{d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \end{aligned} \quad (10.27)$$

При получении этого результата мы использовали (8.13), кроме того, мы воспользовались соотношением (7.30) и тем обстоятельством, что в большой системе $N^2 \gg N$. Результат (10.27) в точности совпадает с бесконечной энергией статического однородно распределенного отрицательного заряда. Точно такой же энергией самодействия обладает и положительный однородно распределенный заряд фона, в то время как энергия взаимодействия электронов с этим фоном равна величине (10.27), умноженной на 2, и имеет противоположный знак. Таким образом, все эти энергии взаимно уничтожаются, и слагаемое с V_0 выпадает из (10.25):

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \sum_{\substack{q, m, n \\ (q \neq 0)}} V_q c_{n-q}^\dagger c_{m+q}^\dagger c_m c_n. \quad (10.28)$$

Перейдем теперь к рассмотрению квазичастиц в таком газе, используя уравнение Дайсона (10.7). Типичная диа-

грамма для неприводимой собственно-энергетической части (10.8) есть

$$\begin{aligned}
 & \begin{array}{c} \text{q, } \epsilon \\ \text{---} \\ \text{k - q,} \quad \text{p,} \quad \text{p + q,} \\ \text{\omega - } \epsilon \quad \text{\beta} \quad \text{\beta + } \epsilon \\ \text{---} \\ \text{q, } \epsilon \end{array} = \\
 & = (-1) \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}} \int \frac{d\epsilon d\beta}{(2\pi)^2} iG_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \epsilon) iG_0(\mathbf{q} + \mathbf{p}, \beta + \epsilon) \times \\
 & \quad \times iG_0(\mathbf{p}, \beta) \frac{(4\pi e^2)^2}{\Omega^2 q^4}. \quad (10.29)
 \end{aligned}$$

Переходя от суммы по \mathbf{q} к интегралу, мы обнаруживаем, что из-за множителя q^4 в знаменателе это выражение расходится при $\mathbf{q} = 0$ [см. соображения, приводящие к формуле (12.19)]. Таким образом,

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} = \infty \quad (10.30)$$

Анализ высших порядков приводит к тому же выводу: большинство диаграмм расходится. Казалось бы, это довольно обескураживающее начало. Положение, однако, можно спасти, проведя частичное суммирование. Отметим сначала, что все расходящиеся диаграммы в любом порядке обладают тем свойством, что линии взаимодействия отвечает один и тот же импульс передачи \mathbf{q} , так как каждая такая линия дает в подынтегральное выражение множитель $1/q^2$. Это так называемые *кольцевые диаграммы*

$$\begin{array}{c} \text{q} \\ \text{---} \\ \text{q} \end{array}, \quad \begin{array}{c} \text{q} \\ \text{---} \\ \text{q} \end{array}, \quad \begin{array}{c} \text{q} \\ \text{---} \\ \text{q} \end{array}, \quad \dots \quad (10.31)$$

Ясно, что именно эти „главные“ диаграммы вносят основной вклад в неприводимую собственно-энергетическую часть Σ .

Поэтому мы можем формально аппроксимировать Σ суммой таких колец

$$\begin{aligned}
 \Sigma &\approx \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots = \\
 &= \text{Конечная величина} + \infty + \infty + \infty + \dots \quad (10.32)
 \end{aligned}$$

Сюда включена и диаграмма „открытая устрица“. „Пузырь“ первого порядка выпал, так как ему соответствует значение $q=0$ [см. (4.54) и (4.46)], а в гамильтониане (10.28) такое слагаемое отсутствует. Таким образом, пузырь уничтожился положительным фоном. Самое замечательное состоит в том, что эту бесконечную сумму бесконечных слагаемых можно вычислить и результат оказывается конечным! Это приводит к так называемому „приближению случайных фаз“ (RPA), хорошо работающему в пределе высоких плотностей, где $r_s < 1$ (в § 3 гл. 12 приведены соображения, показывающие, откуда берется это ограничение).

Суммирование колец проводится легко. Выделим в каждой диаграмме (10.32) множитель, соответствующий функции Грина свободной частицы (это не совсем очевидно для „устрицы“, ибо, согласно правилам табл. 10, она представляет особый случай, но такое выделение для нее все же законно). Получим

$$\begin{aligned}
 \Sigma &\approx \left| \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ \text{diagram 2} \\ \text{diagram 3} \\ \dots \end{array} \right| = \\
 &= \left| \begin{array}{c} \text{diagram 1} \\ \text{diagram 2} \\ \text{diagram 3} \\ \dots \end{array} \right| \times \text{diagram 4} = \frac{k-q}{\omega-\gamma} \left| \begin{array}{c} \text{diagram 4} \\ \text{diagram 5} \\ \text{diagram 6} \\ \dots \end{array} \right| \cdot q \cdot \gamma \quad (10.33)
 \end{aligned}$$

Двойная волнистая линия отвечает „эффективному взаимодействию“ в приближении случайных фаз, о котором уже говорилось в § 9 гл. 4, и интерпретируется как „экраниро-

ванное" взаимодействие между двумя частицами

$$-iV_{\text{эфф}}(\text{RPA}) \equiv$$

$$\begin{aligned} &\equiv \text{wavy}_{\text{RPA}} = \text{wavy}_1 + \text{wavy}_2 + \text{wavy}_3 + \dots = \\ &= \frac{\text{wavy}}{1 - \text{loop}}; \quad \text{loop} \text{ -- "ЭЛЕКТРОН-ДЫРОЧНАЯ ПЕТЛЯ"} \end{aligned} \quad (10.34)$$

Диаграммы вида 1, 2, 3, ..., имеющие одну входящую и одну выходящую линии взаимодействия, называются *поляризованными диаграммами*. Дело в том, что они показывают, как это взаимодействие приводит к „виртуальной поляризации“ среды всеми возможными способами. Например, диаграмма 2 в (10.34), рассматриваемая в (\mathbf{r}, t) -пространстве, при условии, что нижний конец „электрон-дырочной петли“ лежит при \mathbf{r}_1, t_1 , а верхний — при \mathbf{r}_2, t_2 , описывает при $t_1 < t < t_2$, как отрицательный электрон и положительная дырка разделяются в пространстве, образуя „виртуальный диполь“. (Разумеется, при $t > t_1$ координаты частицы и дырки четко не определены. Это, однако, не меняет сути дела — просто виртуальный диполь становится „рыхлым“.)

Уравнение (10.34) можно переписать на языке функций:

$$V_{\text{эфф}}(\text{RPA})(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V_q}{1 + V_q \pi_0(\mathbf{q}, \omega)} \equiv \frac{V_q}{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (10.35)$$

где

$$-i\pi_0(\mathbf{q}, \omega) \equiv \frac{\mathbf{k} + \mathbf{q}}{\epsilon + \omega} \text{loop} \mathbf{k}, \epsilon \quad (10.36)$$

Выражение (10.35) имеет вид взаимодействия между двумя зарядами в диэлектрике с зависящей от частоты, или, как говорят, „обобщенной“, диэлектрической проницаемостью

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + V_q \pi_0(\mathbf{q}, \omega). \quad (10.37)$$

Это, конечно, не простое совпадение. Диэлектрические свойства среды появляются именно из-за ее поляризации полем, а сумма диаграмм (10.34) как раз и описывает поляризацию электронного газа полем одного из них. В отличие

от голгого потенциала V_q выражение $V_{\text{эфф}}(\mathbf{q}, \omega)$ зависит от частоты ω . В (\mathbf{q}, t) -пространстве, переход к которому осуществляется с помощью преобразования Фурье, взаимодействие оказывается зависящим от времени, что связано с инерцией поляризационного заряда.

Используя правила вычисления диаграмм, указанные в табл. 10, можно вычислить $\pi_0(\mathbf{q}, \omega)$:

$$-i\pi_0(\mathbf{q}, \omega) = 2 \times (-1) \int \frac{d^3k d\varepsilon}{(2\pi)^4} \frac{i}{\omega + \varepsilon - \varepsilon_{k+q} + i\delta_{k+q}} \frac{i}{\varepsilon - \varepsilon_k + i\delta_k}. \quad (10.38)$$

Множитель 2 возник из-за суммирования по спинам, а -1 — вследствие присутствия в диаграмме фермионной петли. Этот интеграл вычислен в книге [60]¹⁾ путем контурного интегрирования. Предельное значение при $\omega = 0$ и малых \mathbf{q} оказывается равным

$$\pi_0(\text{малые } \mathbf{q}, \omega = 0) = \frac{\lambda^2}{4\pi e^2}, \quad \lambda^2 = \frac{6\pi n e^2}{\varepsilon_F}, \quad (10.39)$$

где n — плотность электронного газа, а $\varepsilon_F = k_F^2/2m$.

Теперь можно вычислить $V_{\text{эфф}}$ при $\omega = 0$ и малых \mathbf{q} . Полагая $\Omega = 1$ и опуская для простоты спин в выражении (7.71), имеем

$$V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2}. \quad (10.40)$$

Подставляя это выражение и (10.39) в формулу (10.35), в этом предельном случае получаем

$$V_{\text{эфф}}(\text{РРА})(\text{малые } \mathbf{q}, \omega = 0) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2}, \quad (10.41)$$

так что

$$V_{\text{эфф}}(r) \sim \frac{e^2}{r} e^{-\lambda r}. \quad (10.42)$$

Таким образом, мы пришли к экранированному кулоновскому взаимодействию. (Более правильное выражение можно найти в книге [60].) Это проясняет физический смысл эффективного взаимодействия: голый потенциал (10.40) виртуально поляризует среду и поляризационное облако экранирует этот потенциал, превращая его в значительно более слабое эффективное взаимодействие. (Это есть просто взаимодействие между квазичастицами; см. дискуссию, следующую за формулой (2.2), и работу [16].)

Теперь мы можем приступить к вычислению собственно-энергетической части $\Sigma_{\text{РРА}}(\mathbf{k}, \omega)$, представленной диаграммами

¹⁾ См также [8, 69]. — *Прим ред.*

(10.33). Переводя их на язык функций, с помощью выражения (10.35) получаем

$$\begin{aligned}
 -i\Sigma_{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) &= \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\gamma}{2\pi} [(-i)V_{\text{эфф}}(\text{RPA})(\mathbf{q}, \omega)] [iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\gamma)] = \\
 &= \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\gamma}{2\pi q^2} \frac{4\pi e^2}{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \gamma)} \frac{1}{\omega-\gamma-\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}+i\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}. \quad (10.43)
 \end{aligned}$$

Несмотря на тот факт, что все диаграммы в (10.32), за исключением устрицы, которые мы суммировали для получения этого выражения, были расходящимися, окончательный результат (10.43) конечен! Дело в том, что в отличие от голого взаимодействия, стремящегося к бесконечности при $\mathbf{q} \rightarrow 0$, эффективное взаимодействие, как видно из соотношения (10.41), осгается конечным при $\mathbf{q} \rightarrow 0$.

Изучим сначала собственно-энергетическую часть (10.43) в простом предельном случае, когда для $V_{\text{эфф}}$ используется статическое приближение (10.41). С помощью табл. 10 получаем

$$\begin{aligned}
 -i\Sigma_{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) &= -i \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left(\frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2} \right) \int \frac{d\gamma}{2\pi} iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\gamma) = \\
 &= -i \int_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}| < k_F} \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left(\frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2} \right) (-1) = \\
 &= -i \int_{|\mathbf{l}| < k_F} \frac{d^3\mathbf{l}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{(\mathbf{k}-\mathbf{l})^2 + \lambda^2}. \quad (10.44)
 \end{aligned}$$

Подставляя это выражение в уравнение Дайсона (10.9), мы приходим к квазичастицам с энергией

$$\epsilon'_k = \frac{k^2}{2m} + \int_{|\mathbf{l}| < k_F} \frac{d^3\mathbf{l}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{(\mathbf{k}-\mathbf{l})^2 + \lambda^2}. \quad (10.45)$$

Эффективная масса в этом случае в (довольно нереалистическом) пределе больших λ определяется выражением (4.105).

Вычисление (10.43) с полным частотно зависящим потенциалом $V_{\text{эфф}}(\mathbf{q}, \omega)$ — дело довольно хлопотное и здесь обсуждаться не будет (для справки см. [52]). После подстановки окончательного результата в уравнение Дайсона оказывается, что функция Грина $G(\mathbf{k}, \omega)$ имеет „квазичастичный“ вид (8.37), и при k , близких к k_F ,

$$\begin{aligned}
 \epsilon'_k &= \frac{k^2}{2m} - 0,166r_s (\ln r_s + 0,203) \frac{kk_F}{2m} + \text{const}, \\
 \frac{1}{\tau_k} &= 0,252r_s^{1/2} \frac{(k-k_F)^2}{2m}. \quad (10.46)
 \end{aligned}$$

Используя соотношение (4.94), находим, что эффективная масса вблизи поверхности Ферми равна

$$m^* = m [1 - 0,083r_s (\ln r_s + 0,203)]^{-1}. \quad (10.47)$$

Далее выполняется критерий существования квазичастиц (8.38), так как

$$\lim_{k \rightarrow k_F} \frac{\tau_k^{-1}}{\epsilon'_k - \epsilon'_F} \sim \frac{(k - k_F)^2}{k - k_F} = k - k_F \rightarrow 0. \quad (10.48)$$

В результате мы пришли к *квазиэлектрону*, уже упоминаемому в § 3 гл. 1; он состоит из голого электрона и положительного экранирующего облака. Это можно представить себе и иначе — в терминах электронов и дырок. Электрон своим кулоновским потенциалом расталкивает другие электроны из прилегающей к нему области. Следовательно, можно сказать, что этот электрон окружен „дырочным облаком“ или, как обычно говорят, электрон сопровождается „корреляционной дыркой“.

§ 5. „Одетый“, или „эффективный“, потенциал взаимодействия в общем случае

Очевидный путь обобщения концепции „эффективного взаимодействия“ в приближении случайных фаз состоит в учете *всех* поляризационных диаграмм (диаграмм, содержащих одну входящую и одну выходящую волнистые линии взаимодействия) в сумме для $V_{\text{эфф}}$ вместо того, чтобы брать только „электрон-дырочные петли“ (10.34). Таким образом мы получаем обобщенный эффективный (или „одетый“, или „перенормированный“) потенциал взаимодействия

$$\begin{aligned}
 & -iV_{\text{эфф}}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \\
 & \equiv \text{~~~~~} = \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \\
 & \quad + \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \dots \quad (10.49)
 \end{aligned}$$

Ряд (10.49) оказывается возможным просуммировать точно таким же образом, каким из разложения (9.40) было

получено уравнение Дайсона (10.7). Для этого определим сначала „поляризационную часть“¹⁾.

Поляризационной частью называется любая диаграмма без внешних линий взаимодействия, которую можно вставить в линию взаимодействия.

Примеры:

$$(10.50)$$

Неприводимой называется поляризационная часть, которую нельзя разбить на две несвязанные части путем удаления одной линии взаимодействия.

Примеры:

$$(10.51)$$

(Заметьте, что \bigcirc не есть поляризационная часть!) В соответствии с этим диаграммы 2 и 5 в (10.50) являются приводимыми поляризационными частями, а другие диаграммы — неприводимыми. Введем сумму всех неприводимых поляризационных частей, полагая

$$-i\pi(\mathbf{q}, \varepsilon) = \langle \pi \rangle = \text{loop} + \text{loop with wavy line} + \text{loop with wavy line and bubble} + \text{loop with wavy line and bubble and wavy line} + \dots, \quad (10.52)$$

тогда легко получить уравнение для одетого потенциала взаимодействия, аналогичное уравнению Дайсона (10.7) или (10.12):

$$\text{wavy line} = \frac{\text{wavy line}}{1 - \langle \pi \rangle} \quad (10.53)$$

¹⁾ В советской литературе употребляется также термин *поляризационный оператор*. — Прим. ред.

или

$$\text{wavy line} = \text{zigzag line} + \text{zigzag line} \circlearrowleft \pi \text{ wavy line} \quad (10.54)$$

В аналитической форме эти диаграммные уравнения имеют вид

$$V_{\text{эфф}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V_q}{1 + V_q \pi(\mathbf{q}, \omega)} \equiv \frac{V_q}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (10.55)$$

Уравнения (10.53) и (10.55) представляют собой обобщение результатов (10.34) и (10.35), полученных в приближении случайных фаз.

Отметим, что приближение случайных фаз, в котором при вычислении поляризационной части используется только диаграмма \circlearrowleft , справедливо лишь тогда, когда обменное взаимодействие много меньше прямого. Если же обменное взаимодействие существенно, то в поляризационную часть \circlearrowleft надлежит включить и диаграммы типа 3 из (10.50) [диаграмма 3 обменная; она соответствует прямой диаграмме 2 в (10.50)]. Таким образом, мы приходим к следующему приближению для π :

$$\circlearrowleft \pi \approx \text{direct} + \text{exchange} + \text{exchange} + \text{exchange} + \dots \quad (10.55a)$$

Используя эффективный потенциал, можно чрезвычайно сильно упростить разложение для собственно-энергетической части. Рассмотрим какую-нибудь произвольную неприводимую диаграмму для собственно-энергетической части, скажем обменную диаграмму второго порядка

$$\text{exchange diagram} \equiv \text{zigzag} \equiv \text{zigzag} \quad (10.56)$$

[Все эти диаграммы одинаковы; см. (9.35).] В разложении для Σ наряду с диаграммами (10.56) имеются и такие, которые отличаются от них только заменой одной из волнистых линий, скажем верхней, на что-то более сложное. Такие

диаграммы можно сгруппировать, заключив в скобки:

$$\Sigma = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots + \left\{ \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \dots + \text{diagram 7} + \dots \right\} + \text{diagram 8} + \dots \quad (10.57)$$

Так как значение диаграммы для данного импульса и энергетического параметра равно произведению значений составляющих ее частей, мы можем вынести за скобки общий множитель; получим

$$\Sigma = \dots + \text{diagram 4} \times \left\{ \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \right\} + \dots = \dots + \text{diagram 4} + \dots \quad (10.58)$$

Здесь мы использовали соотношение (10.49). Точно так же, как и в (10.57), можно выделить все такие суммы, которые приводят к замене в первой диаграмме каждой последовательности голого взаимодействия эффективным. Это дает

ДИАГРАММЫ ТИПА

$$\text{diagram 1} = \text{diagram 1} \left(\text{diagram 2} \text{ и т.д. АНОМАЛЬНЫЕ} \right)$$

$$\text{diagram 3} = \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \dots$$

$$\text{diagram 3} \equiv \text{diagram 4} = \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \dots \quad (10.59)$$

и т. д., что приводит к следующему разложению:

$$\Sigma = \text{---} \circ + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \quad (10.60)$$

Таким образом, мы приходим к значительно более простому ряду, в котором нет ни одной линии взаимодействия, явно содержащей поляризационные части, и все линии взаимодействия одетые. Следует подчеркнуть, что при построении таких диаграмм нельзя включать поляризационные части, поскольку все они уже учтены заменой \sim на $\sim\sim$. Например, диаграмма

$$\text{---} \text{---} = \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots \quad (10.61)$$

совершенно незаконна, так как она уже включена в диаграммы

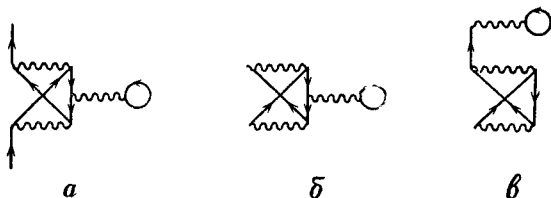
$$\text{---} \text{---} = \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots ! \quad (10.62)$$

Литература для дальнейшего чтения:

- Шульц [60],
- Пайнс [52],
- Пайнс [53],
- Таулес [64],
- Таулес [65],
- Абрикосов, Горьков, Дзялошинский [1],
- Шриффер [58],
- Изли [15],
- Клейн [35],
- Киттель [34],
- Бьеркен, Дрелл [5] } Перенормировка
- Швебер [61], } в квантовой электродинамике —
- Киржниц [69], } основные определения.
- Мигдал [78].

● Упражнения

1. Какие из приведенных диаграмм представляют собой диаграммы для собственно-энергетической части? Какие из них приводимы и какие неприводимы?

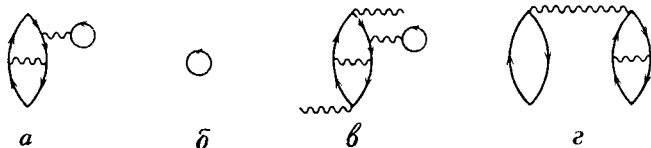


2. Напишите диаграммное уравнение Дайсона в (\mathbf{k}, ω) -пространстве и выражение для неприводимой собственно-энергетической части для системы невзаимодействующих фермионов во внешнем поле. Переведите этот результат на аналитический язык. [Используйте равенство (9.30) вместе с рассуждениями, сопутствующими соотношениям (10.12), (10.13), (10.16).]

3. Постройте несколько первых диаграмм в разложении для функции Грина в приближении случайных фаз

4. Пусть имеется система фермионов, потенциал отталкивающего взаимодействия между которыми есть $A\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$. Используя результат упражнения 6 из гл. 7, найдите точное выражение для K -матрицы. (В этом случае K есть функция только \mathbf{q} и ω .)

5. Какие из нижеследующих диаграмм поляризационные? Какие из них приводимы, а какие неприводимы?



6. Выразите приближенную поляризационную часть, представленную суммой (10.55а), через K -матрицу и переведите результат на аналитический язык (Вам понадобится K -матрица, отвечающая взаимодействию частицы с дыркой. Она дается равенством типа (10.19) с той лишь разницей, что одна сторона лестницы представляет собой дырочную линию.)

САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И СУЩЕСТВОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

§ 1. Одетые линии частиц и дырок или „одевание скелетов“

В предыдущей главе мы видели, как можно украсить ряд для функции Грина, если выразить его через неприводимую собственно-энергетическую часть Σ , которую в свою очередь представить через одетый, или „эффективный“, потенциал взаимодействия. Сейчас мы собираемся провести еще одну косметическую операцию над Σ с помощью частичного суммирования диаграмм, в которых линии содержат собственно-энергетические части. При этом получится ряд, который уже не будет содержать линий с собственно-энергетическими частями; все функции Грина заменятся на одетые. Результат такого суммирования называется „самосогласованной теорией возмущения“. Она будет далее использована для вывода условий существования квазичастиц и для выяснения того, каким образом в системе сильно взаимодействующих ферми-частиц возможно существование резкой поверхности Ферми. В конце настоящей главы мы обсудим дальнейшее упрощение рядов для функции Грина, достигаемое путем частичного суммирования диаграмм для так называемых „вершинных частей“.

В диаграммный ряд для Σ входят подпоследовательности типа

$$\begin{aligned}
 \Sigma &= \dots + \left\{ \begin{array}{l} \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]} + \dots \\ \text{[Diagram 4]} + \text{[Diagram 5]} + \text{[Diagram 6]} + \dots \\ \text{[Diagram 7]} + \dots \end{array} \right\} + \dots \quad (11.1)
 \end{aligned}$$

Здесь каждая из линий частиц содержит все больше и больше собственно-энергетических вставок. Аналогично тому, как это было сделано в случае (10.59), легко убедиться, что суммирование ряда в скобках приводит просто к первой диаграмме из ряда (11.1), в которой свободные функции Грина заменяются точными:

$$\text{Skeleton with double-line loop} = \text{Skeleton with single-line loop} + \text{Skeleton with double-line loop and single-line tail} + \dots \quad (11.2)$$

Первая диаграмма рядов такого типа часто называется „скелетной“, так что процесс перенормировки здесь заключается в одевании костей скелета мясом собственно-энергетических частей — работа своего рода „мясника наоборот“.

Этот трюк можно проделать и над всем рядом, что приводит к более простому ряду

$$\Sigma = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \dots \quad (11.3)$$

Опять-таки следует помнить, что ни одну диаграмму нельзя учитывать дважды. Например, диаграмма

$$\text{Skeleton with two double-line loops} = \text{Skeleton with one double-line loop and one single-line loop} + \text{Skeleton with one double-line loop and one double-line tail} + \dots$$

незаконна, так как все такие диаграммы уже включены в диаграмму 3 ряда (11.3).

Точные функции Грина, входящие в разложение (11.3), конечно, неизвестны — их надо найти из уравнения Дайсона (10.7). Это означает, что уравнения (11.3) и (10.7) следует рассматривать одновременно, и для нахождения точной функции Грина решать их нужно „самосогласованно“. Таким образом, сначала мы вычисляем собственно-энергетическую часть (11.3) с голыми линиями, затем подставляем этот результат в (10.7) для того, чтобы получить одетую функцию Грина в первом приближении, затем опять вычисляем массовый оператор (11.3), используя первое приближение для

функции Грина, и т. д. и т. д. до тех пор, пока все не перестанет изменяться, т. е. результат не станет „самосогласованным“. Такая процедура носит название *самосогласованной теории возмущений*. В первом приближении имеем

$$\Sigma \approx \text{wavy circle} + \text{wavy line}, \text{ где } \text{double line} = \text{single line} + \Sigma \quad (11.4)$$

Это есть общая теоретико-полевая форма уравнения Хартри—Фока. Как уже говорилось после формулы (4.74), последнее применимо и для системы, находящейся во внешнем поле.

Доказательство того, что приближение (11.4) полностью эквивалентно обычному приближению Хартри—Фока, см. в работе [26]

В специальном случае отсутствия внешнего поля функция Грина (4.77) оказывается самосогласованным решением уравнения (11.4) и задачи о реальном самосогласовании не возникает.

Можно перенормировать одновременно как функцию Грина [см. (11.3)], так и потенциал взаимодействия [см. (10.60)], так что вместо (11.3) для собственно-энергетической части получается следующий ряд:

$$\Sigma = \text{wavy circle} + \text{dotted semi-circle} + \text{dotted semi-circle with internal line} + \dots \quad (11.5)$$

В литературе двойные линии часто заменяются одинарными, при этом подразумевается, что все линии, отвечающие функциям Грина и потенциалу взаимодействия, одетые. Проведем, например, самосогласованный расчет в (11.5) в первом порядке. Подставив собственно-энергетическую часть

$$\Sigma \approx \text{wavy circle} + \text{dotted semi-circle} \quad (11.6)$$

в уравнение (10.7), получим

$$\text{double line} = \frac{1}{\text{single line}^{-1} - [\text{wavy circle} + \text{dotted semi-circle}]} \quad (11.7)$$

Мы приходим, по сути дела, к приближению Хартри — Фока, где вместо статического взаимодействия фигурирует „динамическое“ с потенциалом, зависящим от частоты. Если при этом используется перенормированный потенциал \approx в приближении случайных фаз, то говорят о „приближении Хартри — Фока с учетом запаздывания“ [64].

§ 2. Существование квазичастиц в случае применимости теории возмущений

В гл. 10 было показано, что квазичастицы существуют в двух предельных случаях — ферми-газе высокой и низкой плотности. Существуют ли они в других системах, например в электронном газе обычной для металлов плотности или в жидком He^3 ? С помощью разложения по одетым скелетам (11.3) оказывается возможным доказать, что квазичастицы существуют в любой ферми-системе, к которой применима теория возмущений [т. е. в которой справедливо разложение функции Грина (9.40)]. Это так называемые *нормальные* системы; „аномальные“ системы, подобные сверхпроводникам и ферромагнетикам, рассматриваются в § 4 гл. 15 и в работе [45]. Найдем сначала общий вид функции Грина G вблизи энергии Ферми в нормальной системе, а затем докажем, что существуют квазичастицы.

Согласно (10.7), самосогласованное уравнение для функции Грина имеет вид

$$\begin{array}{c} \parallel \\ \uparrow \end{array} = \frac{1}{\downarrow^{-1} - \textcircled{\Sigma}} .$$

или

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega) - i\Sigma_I(\mathbf{k}, \omega)} . \quad (11.8)$$

Здесь собственно-энергетическая часть $\textcircled{\Sigma}$ определяется рядом (11.3). Величины Σ_R и Σ_I представляют собой соответственно действительную и мнимую ее части. Сначала мы постулируем определенную форму для Σ_I вблизи энергии Ферми, а затем проверяем, совместима ли она с самосогласованными уравнениями (11.8) и (11.3).

Чтобы получить указание на то, какую форму выбрать, рассмотрим сначала вклад нескольких первых диаграмм в самосогласованном разложении (10.8). Мы будем использовать описанный в § 7 гл. 9 модифицированный формализм с химическим потенциалом μ , так как именно таким путем легче всего прийти к самосогласованному результату. (Оказывается, что параметр μ есть просто энергия Ферми системы с взаимодействием ϵ'_F .) Мнимые части диаграмм „пузырь“ и „открытая устрица“ равны нулю. Первая диаграмма второго порядка дает

$$\lim_{\omega \rightarrow \mu} \text{Im} \left[\text{Diagram} \right] \sim (\omega - \mu)^2.$$

Исходя из этого, предположим теперь [42], что функция Σ_I имеет следующую предельную форму:

$$\lim_{\omega \rightarrow \mu} \Sigma_I(\mathbf{k}, \omega) = \text{sgn}(\mu - \omega) C_k (\omega - \mu)^2,$$

где

величина $C_k \geq 0$ и действительна,

$$\begin{aligned} \text{sgn}(\mu - \omega) &= -1, & \omega > \mu, \\ &= +1, & \omega < \mu. \end{aligned} \tag{11.9}$$

(Относительно изменения знака при $\omega = \mu$ см. [48].) Тогда функция Грина (11.8) принимает вид

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega) - i \text{sgn}(\mu - \omega) C_k (\omega - \mu)^2}. \tag{11.10}$$

Можно показать, что выражение (11.10) представляет собой самосогласованное решение для G . Подставим его в разложение (11.3). Тогда окажется [42], что

$$\lim_{\omega \rightarrow \mu} \text{Im} \left[\text{Diagram} \right] \sim (\omega - \mu)^2 \tag{11.11}$$

и вообще

$$\lim_{\omega \rightarrow \mu} \left(\text{Diagram} \right) \sim (\omega - \mu)^{2m}, \quad m = 1, 2, 3, \dots \tag{11.12}$$

Следовательно, мнимая часть неприводимой собственно-энергетической части имеет вид

$$\lim_{\omega \rightarrow \mu} \Sigma_I \sim (\omega - \mu)^2,$$

что и предполагалось в (11.9). Это доказывает, что выражение (11.10) действительно представляет собой искомое самосогласованное решение для функции Грина. Оно справедливо для любых систем, в которых справедливо разложение (9.40).

Если справедливо выражение (11.10) для функции Грина, то легко показать, что в такой системе существуют квази-частицы [44]. Для этого получим сначала выражение для энергии одночастичного возбуждения E_k , а затем найдем время жизни этого возбуждения τ_k и покажем, что оно удовлетворяет условию (8.38).

Согласно равенству (3.14), энергию возбуждения системы можно определить, найдя полюсы функции Грина (11.10):

$$\omega - \varepsilon_k - \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega) - i \operatorname{sgn}(\mu - \omega) C_k (\omega - \mu)^2 = 0. \quad (11.13)$$

Одно очевидное решение этого уравнения имеет вид

$$\omega = \mu,$$

причем вектор \mathbf{k} должен удовлетворять уравнению

$$\mu - \varepsilon_k - \Sigma_R(\mathbf{k}, \mu) = 0. \quad (11.14)$$

Уравнение (11.14) определяет поверхность в \mathbf{k} -пространстве — сферу, радиус которой мы обозначим через k_0 . В отсутствие взаимодействия $\Sigma = 0$, а параметр μ равен энергии Ферми ε_F . Поэтому величина k_0 в точности совпадает с k_F — фермиевским импульсом системы без взаимодействия. При наличии взаимодействия $\Sigma \neq 0$ и, как будет показано, величина k_0 в точности равна k'_F — фермиевскому импульсу системы с взаимодействием (см. § 3 гл. 11).

Уравнение (11.13) можно решить и в том случае, когда ω и \mathbf{k} близки к μ и k_0 настолько, что слагаемым $(\omega - \mu)^2$ можно пренебречь. Тогда равенство (11.13) принимает вид

$$\omega - \varepsilon_k - \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (11.15)$$

Решение этого уравнения при заданном \mathbf{k} , $\omega = E_k$, есть энергия одночастичного возбуждения как функция \mathbf{k} для системы с взаимодействием. Предполагая, что вещественную часть Σ_R можно разложить в ряд вблизи k_0 и μ , мы получаем

$$E_k = \mu + \frac{[(\nabla_k \varepsilon_k)_{k_0} + (\nabla_k \Sigma_R)_{k_0, \mu}](k - k_0)}{1 - \left(\frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega}\right)_{k_0, \mu}}. \quad (11.16)$$

Чтобы найти мнимую часть энергии [т. е. „ширину“ или обратное время жизни уровня E_k ; см. обсуждение в связи с формулой (3.18)], необходимо продвинуться до второго порядка, т. е. учесть в (11.13) мнимую часть Σ_I — величину второго порядка. Простейший путь состоит в том, чтобы разложить Σ_R и Σ_I вблизи E_k (а не вблизи \mathbf{k}_0 и μ)

$$\begin{aligned} \Sigma_R(\mathbf{k}, \omega) &= \Sigma_R(\mathbf{k}, E_k) + \left(\frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega} \right)_{E_k} (\omega - E_k) + \dots, \\ \Sigma_I(\mathbf{k}, \omega) &= \Sigma_I(\mathbf{k}, E_k) + \left(\frac{\partial \Sigma_I}{\partial \omega} \right)_{E_k} (\omega - E_k) + \dots = \\ &= \operatorname{sgn}(\mu - E_k) C_k (E_k - \mu)^2 + \dots \end{aligned} \quad (11.17)$$

Подставляя (11.17) в (11.13) и пользуясь равенством (11.15) при $\omega = E_k$, находим

$$\omega = E_k + \frac{i \operatorname{sgn}(\mu - E_k)}{1 - \left(\frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega} \right)_{E_k}} C_k (E_k - \mu)^2. \quad (11.18)$$

Таким образом, мы получили энергию возбуждения и время его жизни.

Подставив выражения (11.17) и (11.15) (при $\omega = E_k$) в формулу (11.8), получим функцию Грина вблизи \mathbf{k}_0 и μ

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z_k}{\omega - \epsilon'_k - i/\tau_k} + f(\mathbf{k}, \omega). \quad (11.19)$$

Здесь

$$Z_k = \left[1 - \left(\frac{\partial \Sigma_R}{\partial \omega} \right)_{E_k} \right]^{-1}, \quad (11.20)$$

$$\epsilon'_k = E_k, \quad (11.21)$$

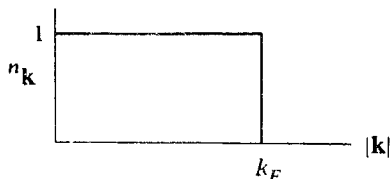
$$\frac{1}{\tau_k} = \operatorname{sgn}(\mu - E_k) Z_k C_k (E_k - \mu)^2, \quad (11.22)$$

а $f(\mathbf{k}, \omega)$ — поправка, обусловленная опущенными в разложении (11.17) слагаемыми более высокого порядка. Вместе с этой (неизвестной) поправкой выражение (11.19) точное. Полагая $\mu = \epsilon'_F$ [см. дискуссию после уравнения (11.14)] и сравнивая выражение (11.19) с (8.37) и (8.38), убеждаемся, что функция $G(\mathbf{k}, \omega)$ имеет точно такой вид, которого следует ожидать при наличии квазичастиц. Таким образом, мы доказали, что, если справедлива теория возмущений, в системе существуют квазичастицы. Единственное дополнительное допущение, которое при этом использовалось, состоит

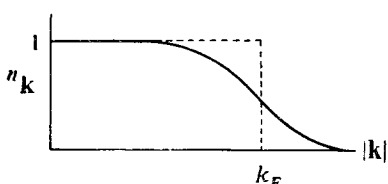
в том, что вблизи точки (\mathbf{k}_0, μ) собственно-энергетическая часть $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ представляет собой гладкую функцию и может быть разложена в степенной ряд¹⁾.

§ 3. Существование поверхности Ферми в системе с взаимодействием

Чтобы оценить всю глубину загадки, связанной с наличием поверхности Ферми, обратимся сначала к функции распределения по импульсам $n_{\mathbf{k}}$ для системы невзаимодействующих фермионов при $T = 0$ в отсутствие внешних полей (фиг. 8). Эта функция есть вероятность заполнения состояния с импульсом \mathbf{k} (голой) частицей. На поверхности Ферми $|\mathbf{k}| = k_F$



Фиг. 8. Функция распределения по импульсам для системы невзаимодействующих фермионов



Фиг. 9. Наивное представление о виде функции распределения голых частиц по импульсам в ферми-системе с взаимодействием.

рассматриваемая функция претерпевает скачок, который и определяет поверхность в \mathbf{k} -пространстве. Далее, в типичной системе с взаимодействием, такой, скажем, как электронный газ, средняя энергия взаимодействия двух частиц сравнима с энергией Ферми (в электронном газе $V \approx 7$ эв, а $\epsilon_F \approx 5$ эв). Наивные физические интуитивные соображения должны, казалось бы, привести к выводу, что столкновения, обусловленные включением столь сильного взаимодействия, вышибают частицы из-под поверхности Ферми, забрасывая их в незанятые состояния над ней и приводя, таким образом, к полному „смазыванию“ скачка, как это видно на фиг. 9. Однако опыт показывает, что для электронов в металлах разрыв непрерывности вблизи $|\mathbf{k}| = k_F$ существует с точностью до 10^{-1} эв!

Эта загадка была решена Мигдалом (см. [52]) и Латтинджером [39]. Названные авторы показали, что скачок $n_{\mathbf{k}}$ су-

¹⁾ В силу нелинейности уравнения Дайсона это решение не обязательно единственное. Соответственно доказательство, здесь полученное, представляет скорее „наведение“ на правильный результат. — *Прим ред.*

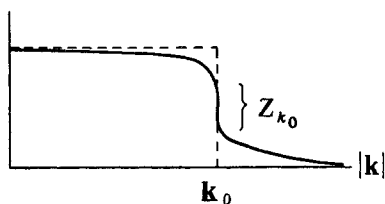
ществует и в системе с взаимодействием, при этом, однако, величина скачка меньше 1. Доказательство основывается на том, что функцию распределения n_k голых частиц по импульсам можно получить непосредственно из одночастичной функции Грина. Это легко увидеть, если принять во внимание, что n_k представляет собой среднее от оператора $c_k^\dagger c_k$ по основному состоянию системы с взаимодействием $|\Psi_0\rangle$

$$n_k = \langle \Psi_0 | c_k^\dagger c_k | \Psi_0 \rangle. \quad (11.23)$$

Воспользовавшись выражением (9.6) для функции Грина и полагая в нем $t_1 = 0$, $t_2 = t$ и $k_1 = k_2$, находим, что n_k можно выразить через функцию Грина следующим образом:

$$n_k = -i \lim_{t \rightarrow 0^-} G(\mathbf{k}, t), \quad (11.24)$$

где символ 0^- означает бесконечно малое время, предшествующее моменту $t = 0$.



Фиг. 10. Функция распределения голых частиц по импульсам в ферми-системе с взаимодействием.

Равенство (11.24) позволяет, в частности, найти функцию распределения в системе, к которой применима теория возмущений. Функция $G(\mathbf{k}, \omega)$ определяется в такой системе соотношением (11.19), а применяя к ней преобразование Фурье, получаем

$$G(\mathbf{k}, t) = -iZ_k \left\{ \theta_t \theta_{E_k - \mu} e^{-iE_k t} e^{-t/\tau_k} - \theta_{-t} \theta_{\mu - E_k} e^{-iE_k t} e^{+it/\tau_k} \right\} + F(\mathbf{k}, t), \quad (11.25)$$

где $F(\mathbf{k}, t)$ есть фурье-трансформанта поправки $f(\mathbf{k}, \omega)$.

Подставляя (11.25) в (11.24), получаем

$$n_k = Z_k \theta_{\mu - E_k} + F(\mathbf{k}, 0^-). \quad (11.26)$$

Предположив, что функция $F(\mathbf{k}, 0^-)$ непрерывна вблизи $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, мы приходим к функции распределения, имеющей на поверхности $E_k = \mu$, т. е., согласно (11.16), как раз при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ скачок, величина которого есть Z_{k_0} . На фиг. 10 изображена

зависимость n_k от k_0 в предположении изотропного взаимодействия, когда поверхность Ферми остается сферической. Сравнивая это распределение с изображенным на фиг. 8, видим, что величины k_0 и μ естественно назвать фермиевским импульсом и энергией Ферми для системы с взаимодействием. Таким образом, если взаимодействие таково, что теория возмущений справедлива, поверхность Ферми существует и в системе с взаимодействием.

Убедительным подтверждением изложенного выше доказательства было бы экспериментальное измерение кривой на фиг. 10. Вычисления [12] показывают, что величина скачка Z_{k_0} существенно отличается от единицы. Например, для металлического Na она составляет примерно 0,5. Измерения такого рода, однако, нельзя произвести ни одним из методов, использующих низкие энергии, например путем определения спектров мягкого рентгеновского излучения. Действительно, указанные методы позволяют найти только функцию распределения квазичастиц, которая почти совпадает с функцией распределения для свободных электронов (взаимодействие между квазичастицами почти отсутствует; см. предпоследний абзац § 1 гл. 8).

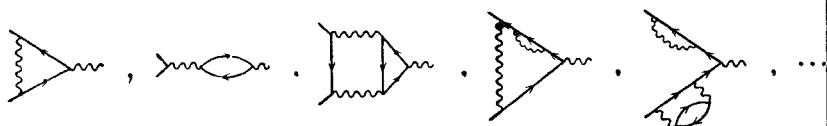
Для измерения функции распределения n_k голых частиц требуются энергии, большие по сравнению с энергией межэлектронного взаимодействия, т. е. достаточно большие, чтобы „раздеть“ эти электроны. Одну из возможностей дают эксперименты по электрон-позитронной аннигиляции, при которой испускаются гамма-кванты с энергиями порядка мегавольт. К сожалению, наблюдение функции распределения n_k затрудняется, по-видимому, эффектами электрон-позитронной корреляции [25]. Другой возможностью является исследование комптоновского рассеяния жестких рентгеновских лучей [54].

§ 4. Одетые вершины

Ранее мы видели, как можно упростить ряд для неприводимой собственнo-энергетической части путем „перенормировки“ взаимодействия (§ 5 гл. 10) и функций Грина (§ 1 гл. 11). В настоящем параграфе будет показано, как еще одно упрощение сводит весь ряд всего к двум слагаемым. Это достигается путем перенормировки вершинных частей. Обычное определение вершинной части следующее:

Вершинной частью называется любая диаграмма без внешних линий, которую можно вставить вместо вершины (т. е. можно привязать к двум линиям частиц и к линии взаимодействия).

Примеры:



(11.27)

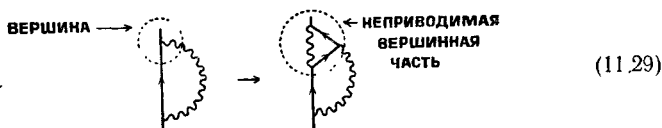
Неприводимой вершинной частью называется диаграмма, которую нельзя разбить на две несвязанные части путем удаления одной линии частицы (или дырки) или одной линии взаимодействия.

Примеры:



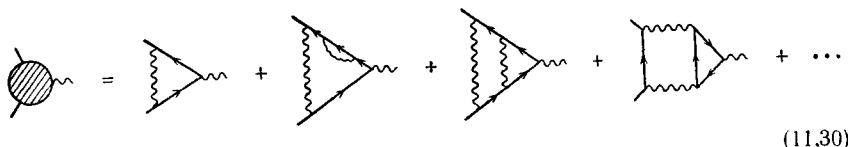
(11.28)

Простая вершина заменяется неприводимой вершинной частью следующим образом:



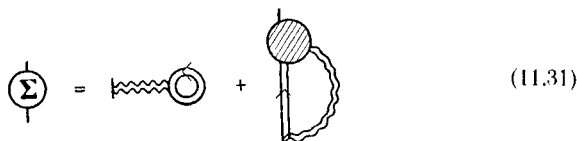
(11.29)

Введем сумму всех неприводимых вершинных частей



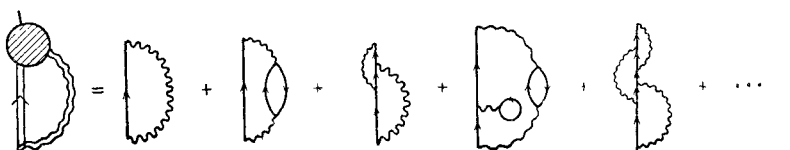
(11.30)

Тогда несложно показать, что неприводимая собственно-энергетическая часть его есть просто



(11.31)

Справедливость этого легко усмотреть из разложения



(11.32)

Отметим, что одетой оказывается только одна из вершин, так как одевание обеих означало бы двукратный учет диаграмм. Например, две диаграммы



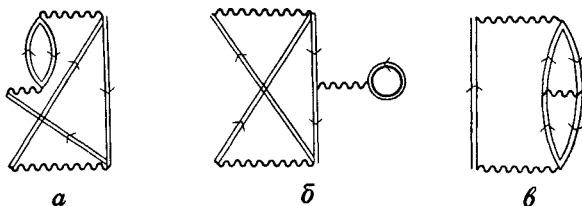
выглядят как вершинные вставки в верхнюю и нижнюю вершины соответственно. Однако это чисто оптический обман. В действительности обе эти диаграммы топологически эквивалентны и, следовательно, представляют собой одну и ту же диаграмму, как это видно из тождества (10.56). Этим мы подытожим необходимые правила игры в диаграммы — нужно быть совершенно трезвым, чтобы не учитывать диаграмму дважды!

Литература для дальнейшего чтения:

Пайнс [52],
Фаликов, Хейне [16],
Латтинджер [41],
Таулес [65],
Швебер [61],
Бьеркен, Дрелл [6],
Мигдал [78].

● Упражнения

1. Какие из приведенных диаграмм не следует включать в разложение (11.3) и почему? Какие из них не надо включать в (11.5) и почему?



2. Пусть мы имеем некую гипотетическую систему, неприводимая собственно-энергетическая часть которой вблизи поверхности Ферми имеет вид

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \approx A\omega + i \operatorname{sgn}(\mu - \omega) B(\omega - \mu)^2,$$

причем $A < 0$, $B > 0$, а параметр μ предполагается известным. Найдите вид функции Грина. Какой имеется скачок на поверхности Ферми?

ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА И ЯДЕРНОЙ МАТЕРИИ

§ 1. Обзор

В гл. 5 мы видели, как с помощью теории возмущений можно получить энергию основного состояния одной частицы во внешнем поле. Этот метод был основан на диаграммном разложении вакуумной амплитуды, из которого диаграммное разложение энергии основного состояния получалось предельным переходом (5.4). [Строгое доказательство, не использующее идеи о детском бильярде (как в гл. 5), содержится в приложениях II—VII.] Было показано, как проводится частичное суммирование диаграммного разложения энергии основного состояния в простейшем случае, когда имеются всего два уровня, и был брошен беглый взгляд на задачу многих тел.

Теперь мы займемся деталями вычисления энергии основного состояния системы многих частиц в отсутствие внешнего поля. Диаграммные правила в этом случае в значительной степени те же, что и для одной частицы, так что мы их просто сформулируем без всяких фанфар и сосредоточим свое внимание на приложении их к задачам об электронном газе и о ядерной материи. Как было установлено Гелл-Маном и Бракнером, главный вклад для электронного газа в пределе высокой плотности дают „кольцевые диаграммы“, каждая из которых сама по себе бесконечна. Они использовали трюк — суммирование всех диаграмм данного порядка; это привело к логарифмическому ряду, который можно было просуммировать, и результат получился конечным. Позднее было показано, что он точен. Случай ядра (низкая плотность) будет рассмотрен очень кратко, потому что проблема эта значительно более сложная и до сих пор полностью не решенная. Мы просто покажем с помощью K -матрицы, как можно осуществить суммирование „лестничных диаграмм“, каждая из

которых сама по себе бесконечна, и на простом примере проиллюстрируем, как такое суммирование приводит к конечному результату.

§ 2. Диаграммы для энергии основного состояния

Согласно (5.42), ряд для энергии основного состояния имеет вид

$$E_0 = W_0 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \text{diagram 8} + \text{diagram 9} + \dots + \text{diagram 10} + \dots \quad (12.1)$$

В этом разложении мы опустили два типа диаграмм:

1. Все диаграммы, получающиеся поворотом одной или более линий взаимодействия на 180° . Это приводит к уничтожению множителя $1/2$ у потенциала взаимодействия [см. (4.60)]. Однако, когда диаграммы полностью симметричны, как, например, в случае „двойного пузыря“ или „устрицы“ или двух диаграмм второго порядка, поворот всех линий взаимодействия не приводит к новым диаграммам, и множитель $1/2$ не исчезает.

2. Все („аномальные“) диаграммы, не сохраняющие импульс (см. стр. 185).

Примерами отброшенных диаграмм служат следующие:



ПОВЕРНУТЫЕ

АНОМАЛЬНЫЕ

Отметим, что здесь важен порядок линий взаимодействия во времени (как это видно уже в случае одной частицы в § 3

гл. 5). Следовательно, мы не можем использовать фейнмановское соглашение, рассмотренное в § 5 гл. 9. Таким образом, две диаграммы топологически эквивалентны, только если одну из них можно перевести в другую путем деформаций, не меняющих временного порядка актов взаимодействия. Например,

(12.3)

Мы дадим рецепт вычисления энергии основного состояния, аналогичный рецептам из „поваренной книги“ диаграммных правил для функции Грина. Фактическое доказательство этих правил крайне сложно и утомительно, однако сами они столь же просты, сколь и использовавшиеся ранее, и никак не будут травмировать читателя.

ДИАГРАММНЫЕ ПРАВИЛА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ В ОТСУТСТВИЕ ВНЕШНЕГО ПОЛЯ

1. Рисуют N горизонтальных волнистых линий так же, как и в случае функции Грина, но без внешних точек.

2. Все вершины соединяют направленными линиями так, чтобы в каждой вершине была одна входящая и одна выходящая линии. Это делается всеми возможными, топологически различными способами, приводящими к связанной диаграмме. (Допускаются только такие деформации, которые сохраняют временной порядок.)

3. Каждой сплошной линии приписывают импульс \mathbf{k} ($\equiv \mathbf{k}, \sigma$). В каждой вершине импульс сохраняется. Отбрасывают все аномальные диаграммы.

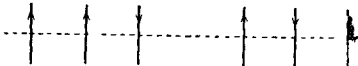
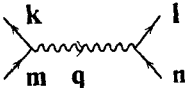



4. Между каждой последовательной парой волнистых линий взаимодействия проводят тонкие пунктирные горизонтальные линии. Например,

(12.4)

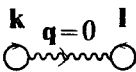
5. Вычисление диаграмм производят в соответствии со словарем табл. 12.

◀ **Диagramмный словарь**
 для энергии основного состояния ферми-системы
 с взаимодействием в отсутствие внешнего поля

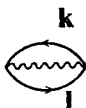
Таблица 12

Элемент диаграммы	Множитель
Пунктирная линия	$\left[\sum_{\text{Дырки}} - \sum_{\text{Частицы}} \right]^{-1}$
	$\sum_{\text{Дырки}} = \text{Сумма значений } \varepsilon_k \text{ для всех дырочных линий, пересекающих пунктирную линию}$ $\sum_{\text{Частицы}} = \text{Сумма значений } \varepsilon_k \text{ для всех линий частиц, пересекающих пунктирную линию}$
Взаимодействие	V_{klmn} или V_q
	
Каждая дырочная линия	-1
	
Каждая фермионная петля	-1
Пример:	
	
Полностью симметричная диаграмма	1/2
Пример:	
	
Каждый импульс частицы (дырки) k	$\sum_k \text{ или } \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$
Частицы: $k > k_F$, Дырки: $k < k_F$,	$k > k_F$ $k < k_F$

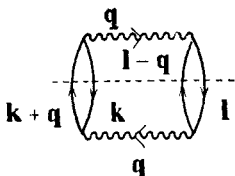
Приведем примеры:

1. Двойной пузырь =  (две фермионные петли, две дырочные линии, диаграмма симметрична)

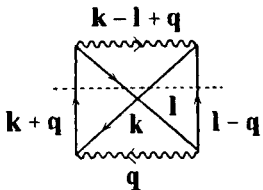
$$= (-1)^4 \times \frac{1}{2} \times \sum_{k, l < k_F} V_{kkl} \quad (12.5)$$

2. Устрица =  (одна фермионная петля, две дырочные линии, диаграмма симметрична)

$$= (-1)^3 \times \frac{1}{2} \times \sum_{k, l < k_F} V_{lkk} \quad (12.6)$$

3.  = $(-1)^4 \times \frac{1}{2} \sum_{q, k, l} \frac{V_q^2}{(\epsilon_k + \epsilon_l - \epsilon_{k+q} - \epsilon_{l-q})}$ (12.7)

($|k|, |l| < k_F$; $|k+q|, |l-q| > k_F$)

4.  = $(-1)^3 \times \frac{1}{2} \sum_{q, k, l} \frac{V_q V_{k+q-l}}{(\epsilon_k + \epsilon_l - \epsilon_{k+q} - \epsilon_{l-q})}$ (12.8)

($|k|, |l| < k_F$; $|k+q|, |l-q| > k_F$)

Применим теперь этот диаграммный метод вычисления энергии основного состояния к задачам об электронном газе высокой плотности и о ядерной материи.

§ 3. Энергия основного состояния электронного газа высокой плотности. Теория Гелл-Манна и Бракнера

В § 9 гл. 4 мы определили электронный газ как „голубую мечту“ теоретиков, интересующихся металлами, — систему из N электронов, движущихся на фоне однородного положительного заряда и взаимодействующих посредством чисто кулоновских сил. Газ характеризуется средним расстоянием между электронами r_s . Гамильтониан системы имеет вид (10.25). Мы показали, как с помощью суммирования колец-

вых диаграмм можно вычислить в пределе высокой плотности ($r_s < 1$) эффективную массу квазичастиц и время их жизни. Здесь мы в том же предельном случае исследуем энергию основного состояния.

Простейшая аппроксимация для энергии основного состояния дается приближением Хартри — Фока, которое в отсутствие внешнего поля приводит просто к поправке первого порядка теории возмущений. На языке диаграмм это приближение можно записать в виде [см. (12.1)]

$$E_{\text{HF}} = W_0 + \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \quad (12.9)$$

Такая грубая аппроксимация не учитывает того факта, что из-за кулоновского отталкивания электроны стремятся держаться подальше друг от друга, т. е. их движение коррелировано. *Корреляционная энергия* определяется следующим образом:

$$E_{\text{corr}} = E_{\text{точная}} - E_{\text{HF}} =$$

$$= \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \dots \quad (12.10)$$

Вычислим сначала энергию в приближении Хартри — Фока. Воспользуемся соотношениями (7.75), (12.5) и (12.6); тогда выражение (12.9) принимает вид

$$E_{\text{HF}} = \sum_{k < k_F} \varepsilon_k + \frac{1}{2} \sum_{k, l < k_F} [V_{klkl} - V_{lkkl}]. \quad (12.11)$$

Первое слагаемое (здесь мы явно учитываем спин) равно

$$W_0 = \sum_{\substack{k < k_F \\ \sigma = \pm \frac{1}{2}}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 2 \times \frac{\hbar^2}{2m} \times \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d^3 \mathbf{k} k^2 = \frac{\Omega \hbar^2}{2\pi^2 m} \times \frac{1}{5} k_F^5, \quad (12.12)$$

где множитель 2 появляется из-за суммирования по спину, Ω — объем кристалла, а $\Omega/(2\pi)^3$ есть плотность состояний в \mathbf{k} -пространстве. Импульс Ферми k_F находится из условия

$$N = 2 \sum_{k < k_F} 1 = \frac{2\Omega}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d^3 \mathbf{k} = \frac{\Omega}{3\pi^2} k_F^3, \quad (12.13)$$

так что, используя равенство (10.24), мы получаем

$$\frac{W_0}{N} = \frac{\Omega}{N} \frac{\hbar^2}{2m} \times \frac{1}{5} \left(3\pi^2 \frac{N}{\Omega} \right)^{5/3} = \frac{2,21}{r_s^2} \text{ ридберг/электрон.} \quad (12.14)$$

Слагаемое с $V_{klkl} \equiv V_{q=0}$, согласно (10.28), равно нулю (оно уничтожается вследствие взаимодействия с положительно заряженным фоном). Оставшееся слагаемое дает (множитель 2 из-за спина)

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \times \text{Diagram} &= -\frac{2}{N} \times \frac{1}{2} \times \left[\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \right]^2 \times \frac{4\pi e^2}{\Omega} \int \int_{k, l < k_F} \frac{d^3k d^3l}{|k-l|^2} = \\ &= -\frac{0,916}{r_s} \text{ ридберг/электрон} \end{aligned} \quad (12.15)$$

(см. [55])¹⁾. Следовательно,

$$\frac{E_{\text{HF}}}{N} = \left(\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right) \text{ ридберг/электрон} \quad (12.16)$$

Обратимся теперь к корреляционной энергии. Первую диаграмму в (12.10) можно вычислить по формуле (12.7). Сумма по спинам дает множитель 4. Переходя от суммы к интегралу, выражая все импульсы в единицах k_F и используя равенство (12.13), для энергии получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \times \text{Diagram} &= \\ &= -\frac{3}{8\pi^5} \int \frac{d^3q}{q^4} \int_{\substack{|k| < 1 \\ |k+q| > 1}} d^3k \int_{\substack{|l| < 1 \\ |q-l| > 1}} d^3l \frac{1}{q^2 + q \cdot (k-l)} \text{ ридберг/электрон.} \end{aligned} \quad (12.17)$$

Подобным же образом диаграмма (12.8) дает

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \times \text{Diagram} &= +\frac{3}{16\pi^5} \int \frac{d^3q}{q^2} \int_{\substack{|k| < 1 \\ |k+q| > 1}} d^3k \int_{\substack{|l| < 1 \\ |q-l| > 1}} d^3l \frac{1}{(k-l+q)^2} \times \\ &\times \frac{1}{q^2 + q \cdot (k-l)} \text{ ридберг/электрон.} \end{aligned} \quad (12.18)$$

Рассмотрим сначала интеграл (12.17). Очевидно, что главный вклад в него дают малые значения q . Из-за ограниченности области интегрирования значения векторов k и l лежат в слое около ферми-поверхности, толщина которого порядка q .

¹⁾ См. также [69] — Прим ред.

При малых q подынтегральное выражение ведет себя как q^{-1} , а $\int d^3\mathbf{k} \int d^3\mathbf{l} \sim q^2$, так что



$$\frac{1}{N} \times \text{Diagram} \sim \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^3} \sim \int \frac{dq}{q} = \infty. \quad (12.19)$$

Причина этой расходимости заключается в дальнедействующем характере кулоновского взаимодействия. Экранированный кулоновский потенциал (10.41) конечен при $q=0$ и поэтому привел бы к конечному результату.

С помощью аналогичных рассуждений для диаграммы (12.18) находим

$$\frac{1}{N} \times \text{Diagram} \sim \int \left[\begin{array}{l} \sim q \text{ для малых } q \\ \sim q^{-4} \text{ для больших } q \end{array} \right] dq =$$

= Конечная величина = 0,046 *ридберг/электрон*. (12.20)

Причина того, что диаграмма  расходится, в то время как диаграмма  конечна, состоит в том, что в первой

из них каждая линия взаимодействия переносит импульс q , чему соответствует множитель $V_q^2 \sim 1/q^4$, в то время как в последней импульс q переносится только одной линией взаимодействия, что дает множитель $1/q^2$.

В третьем порядке мы имеем диаграммы

$$E^{(3)} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \dots + \text{Diagram 3} + \dots \quad (12.21)$$

Они распадаются на классы соответственно тому, отвечает ли импульс q всем трем, двум или одной волнистым линиям. Рассуждения, аналогичные приводившимся в связи с диаграммами второго порядка для малых q , дают

$$E^{(3)} = r_s \left\{ A^{(3)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^5} + B^{(3)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^3} + C^{(3)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q} \right\}, \quad (12.22)$$

где A , B и C — некоторые постоянные. Заметьте множитель r_s . Три слагаемых в формуле (12.22) соответствуют диаграммам трех типов, и мы опять обнаруживаем, что наиболее расходящейся из них оказывается диаграмма с одним и тем же импульсом передачи \mathbf{q} для всех волнистых линий взаимодействия.

Так обстоит дело во всех порядках, и ряд теории возмущений для корреляционной энергии можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 E_{\text{корр}} = & A^{(2)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^3} + B^{(2)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q} + \dots = 0,046 \\
 & + r_s A^{(3)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^5} + r_s B^{(3)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^3} + r_s C^{(3)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q} + \dots \\
 & + r_s^2 A^{(4)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^7} + r_s^2 B^{(4)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^5} + r_s^2 C^{(4)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^3} + r_s^2 D^{(4)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q} + \dots \\
 & + \vdots + \dots + \vdots + \dots
 \end{aligned} \tag{12.23}$$

Все слагаемые можно расположить таким образом (см. диагональные линии), чтобы в каждом порядке расходимости они образовывали ряд по степеням r_s . Это означает, что в пределе высокой плотности, т. е. для малых r_s , в каждом порядке расходимости мы можем ограничиться слагаемыми низшего порядка по r_s . Таким образом,

$$E_{\text{корр}} (\text{Высокая плотность}) = 0,046 + A^{(2)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^3} + r_s A^{(3)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^5} + r_s^2 A^{(4)} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{q^7} + \dots =$$

$$\begin{aligned}
 = & \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]} + \text{[Diagram 4]} + \dots \\
 & + \text{[Diagram 5]} + \dots + \text{[Diagram 6]} + \dots
 \end{aligned}$$

Очевидно, это есть сумма по кольцевым диаграммам, подобным диаграммам (10.31), с которыми мы уже встречались при рассмотрении функции Грина в аналогичном случае.

Из-за того, что в сумме (12.24) существует временной порядок взаимодействий, суммирование здесь не удастся провести так же просто, как в случае функции Грина. Чтобы найти эту сумму, Гелл-Манн и Бракнер использовали трюк, позволивший им просуммировать сначала все диаграммы в каждом порядке теории возмущений. После этого уже легко было вычислить и сумму по всем порядкам теории возмущений. Соль состоит в использовании функции

$$F_q(t) = \int d^3p e^{-i|t| \left(\frac{1}{2} q^2 + q \cdot p \right)} \quad (12.25)$$

и ее фурье-трансформанты

$$Q_q(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ituq} F_q(t) dt. \quad (12.26)$$

Оказывается, что последняя связана с поляризационной частью низшего порядка $\pi_0(\mathbf{q}, \omega)$ [см. (10.36)] соотношением

$$Q_q(u) = \frac{(2\pi)^3}{2} \pi_0(\mathbf{q}, iqu). \quad (12.27)$$

Упомянутые авторы показали, что полный вклад всех кольцевых диаграмм в n -м порядке теории возмущений выражается через эту функцию следующим образом:

$$\frac{E^{(n)}}{N} = \frac{B}{r_s^2} \int q d^3q \int_{-\infty}^{+\infty} du \frac{(-1)^n}{n} \left[\frac{C r_s Q_q(u)}{q^2} \right]^n, \quad (12.28)$$

где B и C — численные множители.

Корреляционная же энергия есть просто сумма вкладов всех порядков

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{корр}}}{N} &= 0,046 + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{E^{(n)}}{N} = \\ &= 0,046 + \frac{B}{N r_s^2} \int q d^3q \int_{-\infty}^{+\infty} du \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \left[\frac{C r_s Q_q(u)}{q^2} \right]^n. \end{aligned} \quad (12.29)$$

До сих пор при осуществлении разного рода частичных суммирований мы сталкивались с геометрическими прогрессиями и с разложениями в ряд квадратных корней. Рассматриваемая теперь частичная сумма кольцевых диаграмм,

$\sum_{n=2}^{\infty}$, представляет собой логарифмический ряд и легко вычисляется:

$$\frac{E_{\text{корр}}}{N} = 0,046 + \frac{B}{Nr_s^2} \int q d^3q \int_{-\infty}^{+\infty} du \left\{ -\ln \left(1 + \frac{Cr_s Q_q(u)}{q^2} \right) + \frac{Cr_s Q_q(u)}{q^2} \right\} \text{ для } \left[\frac{Cr_s Q_q(u)}{q^2} \right]^2 < 1. \quad (12.30)$$

Интегрирование дает

$$\frac{E_{\text{корр}}}{N} = 0,0622 \ln r_s - 0,096 + \mathcal{O}(r_s), \quad (12.31)$$

где

$$\mathcal{O}(r_s) \rightarrow 0 \text{ при } r_s \rightarrow 0.$$

Таким образом, мы получили точное выражение для энергии в пределе высокой плотности.

В изложенных уравнениях использовалось обычное предположение о том, что результат частичного суммирования справедлив и в области малых q , где, согласно неравенству в формуле (12.30), ряд расходится (см. § 3 гл. 3). Это предположение было подтверждено сначала в работе [52], где тот же результат был получен без использования теории возмущений, а затем в работе [52]. В последней статье использовался метод, основанный на вычислении „обобщенной диэлектрической проницаемости“ $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ [см. (10.37)].

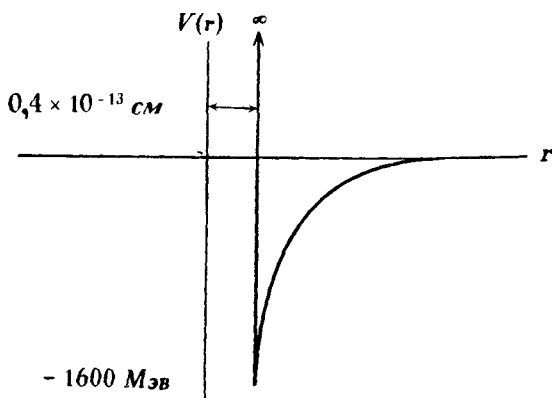
§ 4. Беглый взгляд на теорию ядерной материи Бракнера

Понятие ядерной материи было дано в § 8 гл. 4. Там упоминалось, что энергия связи на частицу (равная энергии основного состояния, если за нуль принять энергию системы без взаимодействия) составляет примерно -16 Мэв. Сейчас мы очень кратко покажем, каким образом можно вычислить эту величину диаграммным методом. Читатель, интересующийся деталями, найдет очень ясное изложение вопроса в книге [15]¹⁾.

Для этих вычислений необходимо иметь потенциал взаимодействия между нуклонами, более реалистичский, чем простой потенциал Юкавы (4.80). Опыты по рассеянию при

¹⁾ См. также [78]. — Прим. ред.

высоких энергиях показывают, что истинный потенциал представляет собой, грубо говоря, сумму бесконечного короткодействующего потенциала отталкивания (твердая сердцевина) и короткодействующего хвоста, отвечающего притяжению (фиг. 11). Несмотря на свой устрашающий вид, отталкивательная часть ядерного потенциала „слаба“ в том смысле, что плотностям нуклонов в тяжелых ядрах отвечают средние расстояния между нуклонами, равные $\sim 1,1 \cdot 10^{-13}$ см, что



Фиг. 11. Вид энергии взаимодействия двух нуклонов (схематически).

V — потенциальная энергия; r — расстояние между нуклонами.

втрое превосходит радиус сердцевин. Это означает, что ядерная материя подобна фермионному газу низкой плотности, причем объем, занятый сердцевиной, составляет $1/27$ часть полного объема.

Энергию основного состояния можно вычислить с помощью разложения (12.1). Как уже отмечалось в § 1 гл. 5, наличие твердой сердцевин приводит к тому, что матричные элементы V_{klmn} , а следовательно, и все слагаемые ряда теории возмущений оказываются бесконечными. Тем не менее, так же как и в случае электронного газа, можно провести частичное суммирование главных диаграмм и получить конечный результат. Для электронного газа высокой плотности главными оказываются кольцевые диаграммы. В ядерном газе низкой плотности наибольший вклад в энергию дают диаграммы только с двумя дырочными линиями [см. дискуссию в связи с разложением массового оператора (10.17)].

Приближенный ряд для энергии основного состояния, включающий диаграммы только такого типа, имеет вид

$$E_0 \approx W_0 +$$

$$(12.32)$$

Техника суммирования таких „лестничных“ диаграмм становится ясной, если подробно выписать несколько первых из них (см. табл. 12 и помни о множителе $1/2$ для симметричных диаграмм!):

$$i \text{---} \text{---} j = \frac{1}{2} \sum_{i, j < k_F} V_{ijij}, \quad (12.33)$$

$$i \text{---} \begin{matrix} n \\ m \end{matrix} \text{---} j = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j < k_F \\ m, n > k_F}} V_{ijmn} V_{mni} \frac{1}{\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_m - \varepsilon_n}, \quad (12.34)$$

$$i \text{---} \begin{matrix} m & n \\ p & q \end{matrix} \text{---} j = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j < k_F \\ m, n, p, q > k_F}} V_{ijmn} V_{mnpq} V_{pqij} \times \\ \times \frac{1}{(\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_m - \varepsilon_n)(\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_p - \varepsilon_q)}, \quad (12.35)$$

и т. д. Эту сумму можно вычислить, вводя не зависящую от частоты K -матрицу, аналогичную (но не идентичную!) частотно зависящей K -матрице, введенной в § 3 гл. 10:

$$K_{mnij} = V_{mnij} + \sum_{p, l > k_F} V_{mnpil} K_{plij} \frac{1}{\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_p - \varepsilon_l}. \quad (12.36)$$

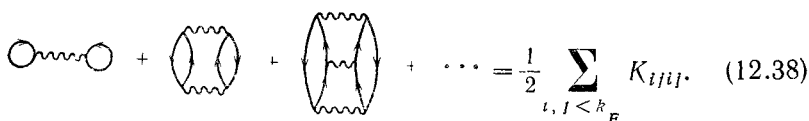
Уравнение (12.36) представляет собой аналог уравнения (10.21), использовавшегося при вычислении функции Грина. Выпи-

шем его для специального случая $m=i$, $n=j$ и будем итерировать:

$$K_{ijij} = V_{ijij} + \sum_{p, l > k_F} V_{ijpl} V_{plij} \frac{1}{\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_p - \varepsilon_l} +$$

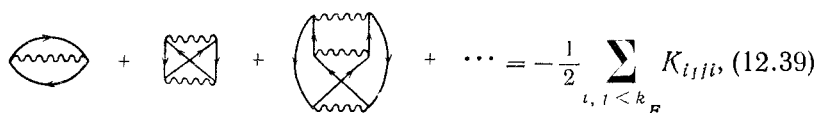
$$+ \sum_{p, l, s, q > k_F} V_{ijpl} V_{plsq} V_{sqij} \frac{1}{(\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_p - \varepsilon_l)(\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_s - \varepsilon_q)} + \dots$$
(12.37)

Суммируя это выражение по всем $i, j < k_F$ и сравнивая результат с формулами (12.33)–(12.35), легко убедиться, что



$$\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots = \frac{1}{2} \sum_{i, l < k_F} K_{ijij}. \quad (12.38)$$

Подобным же образом



$$\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots = -\frac{1}{2} \sum_{i, l < k_F} K_{ijij}. \quad (12.39)$$

так что

$$E_0 \approx W_0 + \frac{1}{2} \sum_{i, j < k_F} (K_{ijij} - K_{ijij}). \quad (12.40)$$

Итак, энергию основного состояния можно выразить через K -матрицу. На первый взгляд это не такое уж большое достижение, поскольку можно было бы ожидать, что из-за бесконечности матричного элемента V_{ijkl} , входящего в уравнение (12.36), бесконечными окажутся и величины K_{ijkl} . Весьма примечательно, однако, что это неверно. Можно показать, что уравнение (12.36) решается даже для потенциала твердой сердцевины и K -матрица оказывается конечной. Следовательно, выражение (12.40) представляет собой хорошее первое приближение для энергии основного состояния.

Простым примером бесконечного потенциала V , приводящего к конечному значению K , служит „спаривающее взаимодействие“,

$$V_{mnij} = \chi \delta_{m-n} \delta_{i-j}, \quad \chi \rightarrow \infty, \quad (12.41)$$

соответствующее взаимодействию частиц только с противоположными импульсами. Здесь через χ обозначена бесконечная константа. Легко видеть, что в этом случае выражение

$$K_{mnl} = \frac{\delta_{m, -n} \delta_{l, -l}}{\frac{1}{\chi} + \sum_{q > k_F} \frac{1}{2(\epsilon_q - \epsilon_l)}} = \text{Конечная величина при } \chi \rightarrow \infty \quad (12.42)$$

и удовлетворяет уравнению (12.36), в чем легко убедиться простой подстановкой (12.41) и (12.42) в (12.36), если учесть, что $\epsilon_k = \epsilon_{-k} = k^2/2m$.

Метод улучшения приближения, состоящий в учете опущенных в (12.32) нелинейных диаграмм высших порядков, становится совершенно ясным, если заметить, что приближение (12.40) выглядит аналогично обычному приближению первого порядка теории возмущений

$$E_0 \approx W_0 + \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} = W_0 + \frac{1}{2} \sum_{i, l < k_F} (V_{ilil} - V_{ilil}) \quad (12.43)$$

с той лишь разницей, что матричные элементы V_{ijkl} заменены на K_{ijkl} . Введем теперь новое „эффективное взаимодействие“, равное K_{ijkl} , которому отвечает диаграмма

$$\begin{array}{c} i \\ \swarrow \\ \text{---} \\ \searrow \\ k \end{array} \text{---} \begin{array}{c} j \\ \swarrow \\ \text{---} \\ \searrow \\ l \end{array} \equiv K_{ijkl} \quad (12.44)$$

Тогда формулу (12.40) можно представить в диаграммном виде:

$$E_0 \approx W_0 + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \quad (12.45)$$

Способ учета диаграмм высшего порядка, гарантирующий то, что все они окажутся конечными, состоит просто в за-

мене \sim на $---$ во всех обычных диаграммах. Таким образом,

$$E_0 \approx W_0 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \dots \quad (12.46)$$

(Отметим, что здесь отсутствуют диаграммы второго порядка, подобные

$$\text{diagram 8} \text{ или } \text{diagram 9},$$

так как они уже включены в диаграммы diagram 1 и diagram 2 . Все это подробно обсуждается в работе [15]¹⁾.)

Обратите внимание, что в действительности при вычислениях характеристик ядерной материи используется метод „неопределенной одночастичной энергии“, в котором к невозмущенному гамильтониану H_0 добавляется, а из гамильтониана взаимодействия вычитается некоторый одночастичный потенциал. Этот метод описан в работах [15, 52].

Литература для дальнейшего чтения:

Пайнс [53],
 Киттель [34],
 Таулес [64],
 Изли [15],
 БРОУН, КЕРРЕЗЕРС [9],
 Киржниц [69],
 Мигдал [78],
 Галицкий [79].

● Упражнения

1. Проверьте, что две последние диаграммы в (12.2) аномальные.
2. Выпишите выражение для первой диаграммы в правой части (12.21).
3. Проведите суммирование следующего ряда диаграмм для энергии:

$$E = \text{diagram 10} + \text{diagram 11} + \text{diagram 12} + \text{diagram 13} + \dots$$

¹⁾ См. примечание на стр. 239. — Прим. ред.

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ И ДВУХЧАСТИЧНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

§ 1. Введение

До сих пор мы имели дело в основном с квазичастичными возбуждениями систем многих тел. Обратимся теперь ко второму из двух типов элементарных возбуждений, определенных в гл. 1, — к коллективным возбуждениям. Как там было отмечено, кванты коллективных возбуждений связаны с коллективным движением системы как целого; к их числу, например, относятся фононы — кванты звуковых волн. Подобно квазичастицам, коллективные возбуждения обладают некоторыми корпускулярными свойствами, однако в отличие от квазичастиц они совершенно не похожи на частицы, образующие данную систему.

Следует отметить здесь, что несмотря на то, что коллективные возбуждения нельзя описать с помощью представления о „голой частице плюс облако“, используемого для описания квазичастиц, мы часто слышим такие выражения, как „одетый“ плазмон или „одетый“ фонон. Дело в том, что если коллективные возбуждения взаимодействуют друг с другом (или с другими элементарными возбуждениями системы), то данное коллективное возбуждение может оказаться окруженным облаком элементарных возбуждений, что и приводит к образованию „одетого“ или „квазиколлективного“ возбуждения.

Коллективные возбуждения можно рассматривать с помощью функции Грина F , отвечающей распространению „флуктуаций плотности“ или „поляризации“ и представляющей собой частный случай двухчастичной функции Грина. Так же как энергии и времена жизни квазичастиц находятся из полюсов одночастичных функций Грина, энергии и времена жизни коллективных возбуждений определяются полюсами поляризационной функции Грина F . Эту новую функцию Грина F можно представить в виде диаграммного разложения, которое оказывается в точности равным сумме по всем „поляризационным частям“, появляющимся при вычислении эффективного потенциала взаимодействия (10.49).

Вычисление F для электронного газа высокой плотности в приближении хаотических фаз (т. е. путем суммирования только повзгорающихся „парных пузырей“) показывает, что F описывает коллективное возбуждение, называемое „свободным плазмоном“. Учет диаграмм высших порядков приводит к „одеванию“ плазмонов, т. е. к перенормировке их энергии и к появлению конечного времени жизни ¹⁾.

§ 2. Двухчастичная функция Грина

В классическом случае двухчастичная функция Грина $P(\mathbf{r}_4 t_4, \mathbf{r}_3 t_3, \mathbf{r}_2 t_2, \mathbf{r}_1 t_1)$ определяет вероятность того, что если одна частица была введена в систему в момент времени t_1 в точку \mathbf{r}_1 , а вторая — в момент времени t_3 в точку \mathbf{r}_3 , то в более поздние моменты времени одна частица окажется в точке $(\mathbf{r}_2 t_2)$, а другая — в точке $(\mathbf{r}_4 t_4)$. Эту вероятность можно найти как сумму вероятностей движения названных частиц по всем различным путям с учетом рассеяния их друг на друге. Таким образом (см. модель на фиг. 5), это можно представить с помощью диаграмм

$$P(\mathbf{r}_4 t_4, \dots, \mathbf{r}_1 t_1) \equiv$$

$$\equiv \begin{array}{c} \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{shaded box} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} \\ = \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + t_m \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \circ m \\ \downarrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \circ m \\ \downarrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \circ m \\ \downarrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \dots \end{array}$$

$$+ \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \dots$$

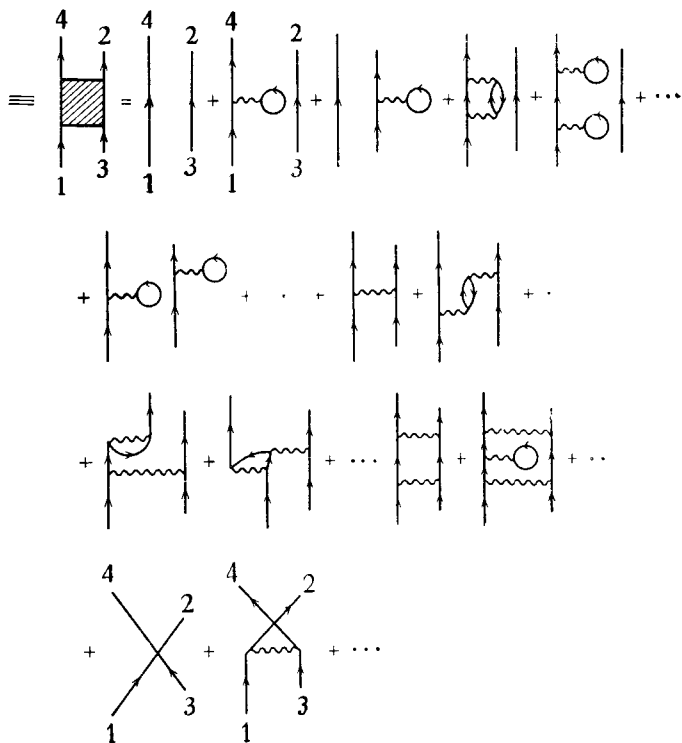
$$+ \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \circ m \\ \downarrow \\ \text{line} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_4 t_4 \\ \uparrow \\ \text{line} \\ \text{---} \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_3 t_3 \\ \uparrow \\ \mathbf{r}_1 t_1 \end{array} + \dots + \dots \quad (13.1)$$

¹⁾ Это не вполне точно, поскольку вследствие затухания Ландау время жизни плазмона оказывается конечным уже в наименьшем приближении. — *Прим. перев.*

Здесь линия — — — — — отвечает столкновению частиц друг с другом. Если теперь линии — — — — — сопоставить вероятность рассеяния P_s (в данном случае $P_s = 1$), то тогда эти диаграммы можно вычислить методом, подобным тому, который использовался в одночастичном случае.

Квантовомеханическую двухчастичную функцию Грина $G_2(\mathbf{r}_4 t_4, \dots, \mathbf{r}_1 t_1)$ также можно определить как амплитуду вероятности того, что если одна частица была введена в систему в момент времени t_1 в точку \mathbf{r}_1 , а вторая — в момент времени t_3 в точку \mathbf{r}_3 , то в более поздние моменты времени одна частица окажется в точке $(\mathbf{r}_2 t_2)$, а другая — в точке $(\mathbf{r}_4 t_4)$. Эту функцию можно представить в виде диаграммного разложения, подобно тому как это делалось в случае детского бильярда. Очевидно, G_2 представляет собой сумму амплитуд всех возможных виртуальных процессов, в которых частицы взаимодействуют с системой и друг с другом. Введем сокращенные обозначения, полагая $(\mathbf{r}_1 t_1) \equiv 1$ и т. д. Тогда указанное разложение примет вид

$$-iG_2(4, 3, 2, 1) \equiv$$



Так же как и в одночастичном случае, имеются и другие возможности, отвечающие другим порядкам следования времен. Например, функция

$$G_2(t_3 > t_4 > t_1 > t_2)$$

определяется как амплитуда вероятности того, что если в точку $(\mathbf{r}_1 t_1)$ введена частица, а из точки $(\mathbf{r}_2 t_2)$ частица удалена (т. е. введена дырка), то в точке $(\mathbf{r}_3 t_3)$ будет обнаружена дырка, а в точке $(\mathbf{r}_4 t_4)$ — частица. Это можно представить с помощью диаграммного разложения

$$-iG_2(4, 3, 2, 1) \equiv$$

$$+ \dots \quad (13.3)$$

Такая форма двухчастичной функции Грина называется функцией Грина „частицы — дырки“¹⁾.

Все возможные определения G_2 , отвечающие всем возможным порядкам следования времен, содержатся в следующем компактном выражении:

$$G_2(4, 3, 2, 1) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \psi(\mathbf{r}_4 t_4) \psi^\dagger(\mathbf{r}_3 t_3) \psi(\mathbf{r}_2 t_2) \psi^\dagger(\mathbf{r}_1 t_1) \} | \Psi_0 \rangle, \quad (13.4)$$

где $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$ и $\psi(\mathbf{r}, t)$ — операторы рождения и уничтожения частицы в момент времени t в точке \mathbf{r} [см. (7.83)], $|\Psi_0\rangle$ — волновая функция основного состояния с учетом взаимодействия, а T — оператор упорядочения во времени, описанный в § 2 гл. 9.

Для функции $G_2(4, 3, 2, 1)$ оказывается возможным написать аналог уравнения Дайсона и использовать его для

¹⁾ Иногда ее называют двухчастичной функцией Грина в канале частица — дырка. — Прим перев.

определения различных свойств системы (см. [64] или [21]). Здесь, однако, мы обсудим только одну специальную форму G_2 , а именно „поляризационную функцию Грина“.

§ 3. Поляризационная функция Грина (функция Грина для флуктуаций плотности)

Как уже говорилось в § 1 настоящей главы, коллективные возбуждения соответствуют регулярным изменениям плотности, т. е. „флуктуациям плотности“ в многочастичной среде. Кажется вполне правдоподобным, что такие волны могут описываться функцией Грина, определяющей их распространение от точки к точке, подобно тому, как одночастичная функция Грина описывает распространение частицы. Таковую функцию Грина легко получить из выражения (13.4) для G_2 , положив $(\mathbf{r}_3, t_3) = (\mathbf{r}_4, t_4)$ и $(\mathbf{r}_1, t_1) = (\mathbf{r}_2, t_2)$. Это приводит к функции Грина для флуктуаций плотности

$$F(\mathbf{z}, 1) = (-i) \langle \Psi_0 | T \{ \psi^\dagger(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z}) \psi^\dagger(1) \psi(1) \} | \Psi_0 \rangle. \quad (13.5)$$

[Согласно определению оператора T — см. (9.4), — для совпадающих времен оператор $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$ должен всегда стоять слева от $\psi(\mathbf{r}, t)$, как это и записано.]

Физический смысл F можно выяснить, замечая, что

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= e^{iHt} \psi^\dagger(\mathbf{r}) e^{-iHt} e^{iHt} \psi(\mathbf{r}) e^{-iHt} = e^{iHt} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) e^{-iHt}, \end{aligned} \quad (13.6)$$

согласно (7.84) и (9.3), есть просто оператор плотности (точнее говоря, числа частиц) в точке \mathbf{r}, t . Следовательно, функцию F можно переписать в виде

$$\begin{aligned} F(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) &= -i \langle \Psi_0 | T \{ \rho(\mathbf{r}_2, t_2) \rho(\mathbf{r}_1, t_1) \} | \Psi_0 \rangle = \\ &= -i \langle \Psi_0 | T \{ \rho(\mathbf{r}_2, t_2) \rho^\dagger(\mathbf{r}_1, t_1) \} | \Psi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (13.7)$$

причем последнее равенство есть следствие соотношения

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = [\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)]^\dagger = \rho^\dagger(\mathbf{r}, t). \quad (13.3)$$

Таким образом, функция F создает „возмущение плотности“ в точке (\mathbf{r}_1, t_1) и переносит его в точку (\mathbf{r}_2, t_2) . [Мы полагаем, что гамильтониан H не зависит от времени и система однородна (отсутствуют внешние поля), так что функция F зависит только от разности временных и пространственных переменных.]

Диаграммное разложение для F можно немедленно получить из разложения для G_2 , (13.3), полагая там $(\mathbf{r}_3, t_3) =$

$= (r_4, t_4)$ и $(r_1, t_1) = (r_2, t_2)$, т. е. соединяя в каждой диаграмме свободные концы. Таким образом,

$$-iF(r_3 - r_1, t_3 - t_1) \equiv$$

$$\begin{aligned} &\equiv \begin{array}{c} \Gamma_3, t_3 \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \Gamma_1, t_1 \end{array} \equiv \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots \\ &+ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots \end{aligned} \quad (13.9)$$

Это есть не что иное, как сумма „поляризационных частей“ [см. (10.50)], вследствие чего функция F и называется *поляризационной функцией Грина*.

Переходя в выражении (13.9) к (\mathbf{k}, ω) -пространству, легко вычислить этот ряд. Надо лишь воспользоваться уравнением (10.49) для эффективного потенциала взаимодействия. Таким путем получаем

$$\frac{(\text{---}) - (\text{---})}{(\text{---})^2} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots = \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad (13.10)$$

Следовательно, подставляя (10.53) в (13.10), находим

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} = \frac{\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array}}{1 - \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array}}, \quad (13.11)$$

или

$$F(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\pi(\mathbf{k}, \omega)}{1 + V_k \pi(\mathbf{k}, \omega)} = \frac{\pi(\mathbf{k}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (13.12)$$

где было использовано соотношение (10.55). Таким образом, функция Грина для флуктуаций плотности, или „поляриза-

ционная функция Грина“, выражается через сумму всех неприводимых поляризационных частей π и связана с обобщенной диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$.

§ 4. Функция Грина для коллективных возбуждений

Так как квазичастицы схожи со свободными частицами, физические рассуждения приводят нас к выводу (см. гл. 3), что их функция Грина должна быть подобна функции Грина свободной частицы, правда, с другим законом дисперсии и с отличным от нуля затуханием. В случае коллективных возбуждений физическая интуиция не столь полезна, так как они не имеют никакого отношения к свободным частицам. Однако если обратиться к какому-нибудь хорошо известному случаю, например к фононам, то становится возможным угадать общий вид функции Грина коллективных возбуждений.

В решетке с чисто гармоническим межатомным взаимодействием (1.28) фононы описывают точные собственные состояния системы. Фононная функция Грина введена в гл. 16 сразу же после уравнения (16.41). В соответствии с этим мы можем полагать, что, когда коллективные возбуждения описывают точные собственные состояния системы, общий вид функции $F(\mathbf{k}, \omega)$ следующий:

$$F_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{B_k}{\omega^2 - \omega_k^2 + 2i\omega_k\delta} = \frac{(2\omega_k)^{-1} B_k}{\omega - \omega_k + i\delta} - \frac{(2\omega_k)^{-1} B_k}{\omega + \omega_k - i\delta}. \quad (13.13)$$

Здесь функция B_k не зависит от частоты ω , а ω_k задает закон дисперсии возбуждений. Это выражение называется свободной функцией Грина коллективных возбуждений, вследствие чего мы приписали ей индекс „0“. Она представляет собой аналог функции Грина свободной частицы G_0 [см. (8.35)], однако в отличие от последней имеет как положительно-частотную, так и отрицательно-частотную составляющие. И, уж конечно, частота ω_k совершенно отлична от ϵ_k ($= k^2/2m$).

Если же коллективные возбуждения не отвечают точным собственным состояниям системы, т. е. если они могут взаимодействовать либо друг с другом, либо с другими элементарными возбуждениями, то мы сталкиваемся с чем-то подобным квазичастицам. Взаимодействие между возбуждениями приводит к перенормированному закону дисперсии ω'_k и к конечному времени жизни τ_k (достаточно большому, чтобы вся картина оставалась справедливой). Таким обра-

зом, выражение (13.13) заменяется аналогом формулы (8.37) для функции Грина квазичастицы:

$$F_{\text{одетая}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{B'_k}{\omega^2 - \omega_k'^2 + 2i\omega_k'/\tau_k}, \quad \text{где} \quad \frac{1}{\tau_k} \ll \omega_k'. \quad (13.14)$$

Это и есть функция Грина одетого коллективного возбуждения.

Согласно формулам (13.13) и (13.14), полюсы поляризационной функции Грина определяют энергии коллективных возбуждений. Это имеет простой физический смысл, который можно выяснить, рассмотрев точное выражение (13.12) для $F(\mathbf{k}, \omega)$. Полюсы $F(\mathbf{k}, \omega)$ отвечают, очевидно, таким значениям (\mathbf{k}, ω) , при которых обобщенная диэлектрическая проницаемость обращается в нуль. Это означает, что в системе могут происходить колебания плотности в отсутствие вынуждающих внешних полей, подобные, например, резонансным колебаниям в идеальном контуре (без сопротивления) или колебаниям гитарной струны без трения. Это и есть коллективные колебания.

Общие условия, при которых функция $F(\mathbf{k}, \omega)$, [см. (13.12)], приобретает форму функции Грина коллективных возбуждений (13.14), можно найти, разлагая выражение (13.12) вблизи его полюсов, точно так же, как это делалось в § 2 гл. 11 для $G(\mathbf{k}, \omega)$. Разобьем прежде всего поляризационную часть π на действительную и мнимую части

$$F(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\pi_R + i\pi_I}{1 + V_k \pi_R + iV_k \pi_I}. \quad (13.15)$$

Определим Ω_k как решение уравнения

$$1 + V_k \pi_R(\mathbf{k}, \Omega_k) = 0, \quad (13.16)$$

аналогичного уравнению (11.15) для квазичастиц, и разложим π_R в ряд около Ω_k , считая, что π_R есть медленно меняющаяся функция не от ω , а от ω^2 (то, что это именно так, мы увидим на примере, который рассмотрим в следующем параграфе):

$$\pi_R(\mathbf{k}, \omega) = \pi_R(\mathbf{k}, \Omega_k) + \left(\frac{\partial \pi_R}{\partial \omega^2} \right)_{\Omega_k} (\omega^2 - \Omega_k^2) + \dots \quad (13.17)$$

Подставляя это разложение в формулу (13.15), получаем

$$F(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{2\Omega_k}{V_k} \times \frac{\pi(\mathbf{k}, \Omega_k)}{(\partial \pi_R / \partial \omega)_{\Omega_k}} \times \frac{1}{\omega^2 - \Omega_k^2 + 2i\Omega_k \left(\frac{\pi_I}{(\partial / \partial \omega) \pi_R} \right)_{\Omega_k}}. \quad (13.18)$$

Ясно, что это выражение имеет форму функции Грина (13.14) затухающих коллективных возбуждений, справедливую при условии

$$\frac{1}{\tau_k} = \left(\frac{\pi_I}{(\partial/\partial\omega) \pi_R} \right)_{\Omega_k} \ll \Omega_k. \quad (13.19)$$

§ 5. Плазмоны и квазиплазмоны

Удобным объектом для рассмотрения коллективных возбуждений служит электронный газ высокой плотности, так как в этом случае, согласно результатам § 4 гл. 10 и § 3 гл. 12, оказывается применимым приближение случайных фаз. Это означает, что из суммы всех неприводимых поляризационных частей можно оставить только одну диаграмму (10.36):

$$\begin{aligned} \langle \pi \rangle &= \langle \text{ } \rangle \equiv -i\pi_0(\mathbf{k}, \omega) = \\ &= -i(\pi_{0R} + i\pi_{0I}). \end{aligned} \quad (13.20)$$

Подстановка ее в выражения (13.11) и (13.18) дает

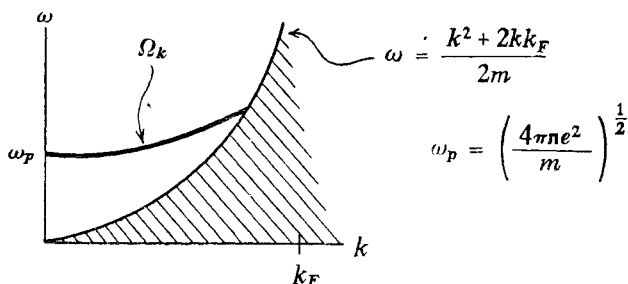
$$F_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\Omega_k}{V_k} \times \frac{\pi_0(\mathbf{k}, \Omega_k)}{\left(\frac{\partial \pi_{0R}}{\partial \omega} \right)_{\Omega_k}} \times \frac{1}{\omega^2 - \Omega_k^2 + 2i\Omega_k \left(\frac{\pi_{0I}}{(\partial/\partial\omega) \pi_{0R}} \right)_{\Omega_k}}. \quad (13.21)$$

Чтобы выяснить, удовлетворяется ли при этом условие (13.19), и найти частоты Ω_k , нужно вычислить функцию $\pi_0(\mathbf{k}, \omega)$. Дело сводится к взятию интеграла (10.38) (см. [60])¹⁾. Некоторые результаты можно выразить с помощью фиг. 12. Оказывается, что в незаштрихованной части графика $\pi_{0I} = 0$ и, следовательно, условие (13.19) несомненно выполняется. Решение уравнения (13.16) для полюсов Ω_k в этой области представлено в виде жирной кривой. [Величина ω_p есть классическая „плазменная“ частота, т. е. частота колебаний плотности электронного газа (см. [55]).] Сравнивая выражение (13.21) с формулами (13.13) и (13.14), видим, таким образом, что здесь мы имеем дело с функцией Грина коллективных возбуждений с бесконечным временем жизни и с законом дисперсии Ω_k . Такие возбуждения носят название *свободных плазмонов* и представляют собой второй тип

¹⁾ См. также [8, 69, 79]. — Прим. ред.

возбуждений электронного газа (первый тип — это квази-электроны).

Сопоставим теперь функции Грина свободного или „голого“ плазмона пунктирную вертикальную линию. Тогда ее



Фиг. 12. Закон дисперсии плазмонов (жирная кривая).

диаграммное разложение, согласно (13.11) и (13.20), имеет вид

$$\text{RPA} \equiv \text{---} = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \quad (13.22)$$

Если к разложению --- добавить поляризационные части высших порядков, то они будут описывать взаимодействие плазмонов друг с другом и с квазиэлектронами, приводящее к превращению голого плазмона в „одетый“, или в „квази-плазмон“ с конечным временем жизни. В этом легко убедиться, если в разложении поляризационной функции Грина учесть, например, диаграмму --- :

$$\text{---} \approx \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots$$

(13.23)

Перегруппировывая слагаемые этого разложения и используя соотношение (13.22), получаем

$$\begin{aligned}
 \text{Diagram} &\approx \left[\text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \dots \right] + \left[\text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \dots \right] + \left[\text{Diagram 5} + \dots \right] = \\
 &= \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} + \text{Diagram 10} + \dots + \text{Diagram 11} + \dots \quad (13.24)
 \end{aligned}$$

$$\equiv \text{Diagram 12} + \text{Diagram 13} + \text{Diagram 14} + \dots = \text{Diagram 15} \quad (13.25)$$

Здесь последняя (двойная) линия соответствует одетому плазмону. Таким образом, поляризационная часть Diagram 13 играет такую же роль, как и неприводимая собственно-энергетическая часть в одноэлектронной функции Грина, одевая плазмон так же, как собственно-энергетическая часть одевает электрон.

Литература для дальнейшего чтения:

- Раймс [55],
 Пайнс [53],
 Шульц [60],
 Пайнс [52],
 Киржниц [69],
 Галицкий [74].

● Упражнения

1. Пусть речь идет о таком взаимодействии, при котором в разложении (13.2) наибольшую роль играют процессы рассеяния лестничного типа. Выпишите ряд по таким процессам (игнорируя для простоты лестничные диаграммы с „пересечениями“) и получите в диаграммной форме интегральное уравнение для G_2 . Выразите результат через K -матрицу (10.19).

2. Просуммируйте ряд (13.22) для плазменной функции Грина в приближении случайных фаз и покажите, что результат имеет форму (13.11) с

$$\left(\pi \right) \approx \left(\begin{array}{c} \curvearrowright \\ \curvearrowleft \end{array} \right)$$

3. Просуммируйте ряд для одетых плазмонов:

а) не проводя перегруппировки [как в (13.23)];

б) после перегруппировки [см. (13.24)].

в) Воспользовавшись ответом к задаче 2, докажите, что оба эти результата совпадают.

ФЕРМИ-СИСТЕМЫ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

§ 1. Обобщение случая $T = 0$

Рассмотренные до сих пор задачи — исследование возбужденных состояний (т. е. элементарных возбуждений) и вычисление энергии основного состояния системы — были физически нереалистичными в том смысле, что система многих тел предполагалась находящейся при нулевой температуре. Это прекрасное приближение для ядер, энергии которых велики по сравнению с обычными тепловыми энергиями (порядка $1/40$ эв), и для твердых тел при чрезвычайно низких температурах. Однако для ядер в горячей плазме и в звездах или для твердых тел в обычных условиях приближение $T = 0$ может оказаться очень плохим. При конечных температурах система распределена статистически по всем своим возбужденным состояниям. Это означает, что „среднее“ по основному состоянию $\langle \Psi_0 | \dots | \Psi_0 \rangle$, которое использовалось для вычисления функций Грина при $T = 0$, следует заменить средним по большому каноническому ансамблю.

Тех, кто только-только овладел сложной диаграммной техникой при $T = 0$, зрелище поднимающей свою ужасную голову температуры может заставить, как Архимеда, воскликнуть: „Не трогай моих диаграмм!“ Самое, однако, замечательное состоит в том, что учет температуры действительно „не тронет“ диаграмм. При $T > 0$ они строятся точно так же, как и при $T = 0$. Разница между двумя этими случаями заключена только в словаре, с помощью которого прямые и волнистые линии переводятся на обычный язык. Это позволяет без лишних хлопот получить теорию при конечных температурах из теории при $T = 0$.

Возьмем, например, одночастичную функцию Грина \mathcal{G} при конечной температуре. С ее помощью среди прочих вещей можно найти температурную зависимость закона дис-

персии квазичастиц, функцию распределения частиц по импульсам и т. д. Диаграммное разложение для \mathcal{S} имеет тот же вид, что и при $T=0$. Разница состоит лишь в том, что каждой направленной линии сопоставляется статистический множитель, время заменяется мнимой переменной, а из энергии вычитается химический потенциал μ .

Другой пример — статистическая сумма Z , представляющая собой ключ к равновесной термодинамике системы многих частиц. Любую величину — энергию, энтропию, давление и т. д. — легко вычислить, коль скоро найдена статистическая сумма Z . Мы покажем, что значение Z пропорционально вакуумной амплитуде при конечной температуре, и, следовательно, статистическую сумму можно найти с помощью тех же диаграмм, которые используются для вычисления энергии основного состояния E_0 .

§ 2. Статистическая механика в представлении вторичного квантования

Поскольку метод вторичного квантования относится к системам, в которых число частиц N , вообще говоря, не фиксировано, мы должны использовать статистический метод, пригодный для задач с переменным числом N , например метод *большого канонического ансамбля*. При этом имеется в виду, что наша система помещена в резервуар, образованный частицами того же сорта, что и система, и находящийся при температуре T . Система имеет возможность отдавать и получать частицы или энергию из резервуара.

Пусть гамильтониан системы, H , задается выражением (7.51). Так как число частиц N переменное, собственные функции $|\Psi_i\rangle$ гамильтониана H будут зависеть от N . Пусть собственной функции $|\Psi_i\rangle$ отвечает число частиц N_i и энергия E_i . Тогда

$$H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle, \quad \sum_k c^\dagger c_k |\Psi_i\rangle = N_i |\Psi_i\rangle. \quad (14.1)$$

Вероятность того, что система (рассматриваемая как член ансамбля) будет обнаружена в состоянии $|\Psi_i\rangle$, дается формулой

$$\mathcal{P}_i = \frac{e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}}{\sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}} = \frac{\rho_i}{Z}. \quad (14.2)$$

Здесь μ — химический потенциал, равный энергии, требуемой для удаления из системы одной частицы; $\beta = 1/kT$ (k — постоянная Больцмана). Знаменатель Z в выражении (14.2) называется *статистической суммой* системы с переменным числом частиц, а числитель ρ_i — *функцией распределения*. Эти величины удобно выразить через *статистический оператор*

$$\rho = e^{-\beta(H - \mu N)}, \quad (14.3)$$

где N — оператор числа частиц. Тогда

$$\rho_i = \langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle, \quad (14.4)$$

$$Z = \text{Sp } \rho, \quad \mathcal{P}_i = \frac{\langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle}{\text{Sp } \rho}. \quad (14.5)$$

Чтобы найти среднее значение любого оператора \mathcal{O} , нужно вычислить его взвешенное среднее

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_i \langle \Psi_i | \mathcal{O} | \Psi_i \rangle \mathcal{P}_i = \frac{\text{Sp } \mathcal{O} \rho}{\text{Sp } \rho}. \quad (14.6)$$

Например, средняя энергия есть

$$\bar{E} = \langle H \rangle = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}}{\sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}} = - \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right)_{\beta \mu}. \quad (14.7)$$

В выражении (14.6) фигурируют точные многочастичные собственные функции $|\Psi_i\rangle$. Поскольку в общем случае они неизвестны, следует использовать тот факт, что значение шпура не зависит от выбора представления, и работать в каком-либо более удобном базисе, скажем $|\Phi_n\rangle$. В качестве последнего обычно выбирают собственные функции системы без взаимодействия. Тогда

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{i, p} \langle \Phi_i | \mathcal{O} | \Phi_p \rangle \langle \Phi_p | \rho | \Phi_i \rangle}{\sum_i \langle \Phi_i | \rho | \Phi_i \rangle}. \quad (14.8)$$

Используем теперь приведенные выше соотношения для быстрого (хотя, возможно, выглядящего несколько таинственно!) вывода некоторых хорошо знакомых нам результатов для системы невзаимодействующих фермионов. В этом случае гамильтониан и собственные функции имеют вид

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k, \quad |\Phi_i\rangle = |n_1^i, n_2^i, \dots, n_k^i, \dots\rangle. \quad (14.9)$$

Функция распределения равна

$$\begin{aligned} \rho_{i0} &= \langle \Phi_i | e^{-\beta \sum_k (\epsilon_k - \mu_0) c_k^\dagger c_k} | \Phi_i \rangle = \\ &= e^{-\beta \sum_k (\epsilon_k - \mu_0) n_k^i} = \prod_k e^{-\beta (\epsilon_k - \mu_0) n_k^i}, \end{aligned} \quad (14.10)$$

где μ_0 — химический потенциал (равный энергии Ферми) системы без взаимодействия (индекс „0“ обозначает отсутствие взаимодействия в системе). Статистическую сумму можно представить в виде

$$Z_0 = \text{Sp } \rho_0 = \sum_i \rho_{i0} = \sum_{n_1^i, \dots, n_k^i, \dots} \prod_k e^{-\beta (\epsilon_k - \mu_0) n_k^i}. \quad (14.11)$$

Первому слагаемому этой суммы отвечает набор

$$\{n_1^i, \dots, n_k^i, \dots\} = \{0, 0, 0, \dots\},$$

второму — $\{1, 0, 0, 0, \dots\}$ и т. д., так что

$$\begin{aligned} Z_0 &= 1 + e^{-\beta (\epsilon_1 - \mu_0)} + e^{-\beta (\epsilon_2 - \mu_0)} + \dots e^{-\beta (\epsilon_1 - \mu_0)} e^{-\beta (\epsilon_2 - \mu_0)} + \dots = \\ &= \prod_k [1 + e^{-\beta (\epsilon_k - \mu_0)}]. \end{aligned} \quad (14.12)$$

При этом мы использовали то обстоятельство, что $n_k = 0$ или $n_k = 1$.

Отсюда можно вычислить среднее значение всех операторов для систем без взаимодействия. Например, среднее число частиц с импульсом k в этой системе (заметим, что операторы ρ и $c_k^\dagger c_k$ диагональны в представлении собственных функций $|\Phi_i\rangle$ гамильтониана H , так что $\langle \Phi_i | \rho | \Phi_j \rangle = 0$ при $i \neq j$ и т. д.) будет

$$\begin{aligned} \langle n_k \rangle &= \langle c_k^\dagger c_k \rangle_0 = \sum_{\dots n_k^i \dots} \langle n_1^i, \dots, n_k^i, \dots | c_k^\dagger c_k | n_1^i, \dots, n_k^i, \dots \rangle \times \\ &\quad \times \prod_l \frac{e^{-\beta (\epsilon_l - \mu_0) n_l^i}}{1 + e^{-\beta (\epsilon_l - \mu_0)}}. \end{aligned} \quad (14.13)$$

Вклад дает только то слагаемое, для которого

$$\langle \dots, n_k^i, \dots | c_k^\dagger c_k | \dots, n_k^i, \dots \rangle = 1 \quad (\text{т. е. } n_k = 1).$$

Поэтому

$$\langle n_k \rangle_0 = \frac{e^{-\beta(\epsilon_k - \mu_0)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu_0)}} \sum_{\dots n_k^i \dots} \prod_{l \neq k} \frac{e^{-\beta(\epsilon_l - \mu_0) n_l^i}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_l - \mu_0)}}. \quad (14.14)$$

Сумма произведений в этом выражении равна единице [см. формулу (14.12)], и мы приходим к окончательному результату

$$\langle n_k \rangle_0 = \langle c_k^\dagger c_k \rangle_0 = \frac{1}{e^{+\beta(\epsilon_k - \mu_0)} + 1} = f_k^-, \quad (14.15)$$

т. е. к хорошо известному распределению Ферми. Оно получено здесь элегантно, но довольно неприятным способом. Вычислим еще одно полезное среднее $\langle c_k c_k^\dagger \rangle$. Мы имеем

$$\langle c_k c_k^\dagger \rangle_0 = \langle 1 \rangle_0 - \langle c_k^\dagger c_k \rangle_0 = 1 - f_k^- = \frac{1}{e^{-\beta(\epsilon_k - \mu_0)} + 1} = f_k^+. \quad (14.16)$$

§ 3. Функция Грина при конечных температурах

Функция Грина системы N взаимодействующих частиц при нулевой температуре в отсутствие внешних полей имеет вид

$$G(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | T \{ c_k(t_2) c_k^\dagger(t_1) \} | \Psi_0 \rangle; \quad (14.17)$$

она представляет собой, очевидно, среднее значение (математическое ожидание) оператора $T \{ c_k(t_2) c_k^\dagger(t_1) \}$ по основному состоянию. Следовательно, функцию Грина при конечных температурах можно получить усреднением того же самого оператора по ансамблю систем при температуре T . Согласно соотношению (14.6), это дает

$$\begin{aligned} G^T(\mathbf{k}, t_2 - t_1) &= -i \langle T \{ c_k(t_2) c_k^\dagger(t_1) \} \rangle = \\ &= -i \frac{\text{Sp } T \{ c_k(t_2) c_k^\dagger(t_1) \} \rho}{\text{Sp } \rho}. \end{aligned} \quad (14.18)$$

Наша цель состоит в вычислении этой функции и с ее помощью — характеристик системы. Было бы прекрасно, если бы G^T можно было разложить по диаграммам так же, как это делалось в случае функции G , и использовать затем метод частичного суммирования. Однако для функции G^T этого сделать не удастся. Диаграммное разложение можно тем не менее построить для модифицированной функции

Грина, называемой *термодинамической* (или *мацубаровской*)¹⁾. Последняя определяется равенством

$$\mathcal{S}(\mathbf{k}, \tau_2 - \tau_1) = -i \langle T \{c_{\mathbf{k}}(\tau_2) c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau_1)\} \rangle, \quad (14.19)$$

где

$$\mathcal{G}(\tau) = e^{(H - \mu N)\tau} \mathcal{G} e^{-(H - \mu N)\tau}$$

и

$$0 < \tau_1, \quad \tau_2 < \beta, \quad \tau - \text{действительная величина.}$$

Очевидно, функцию \mathcal{S} можно получить из G^T путем следующих замен:

$$\begin{aligned} H &\rightarrow H - \mu N, \\ it &\rightarrow \tau. \end{aligned} \quad (14.20)$$

Так как параметр τ действителен, то $t = -i\tau$ — чисто мнимая величина. Поэтому \mathcal{S} называют также „функцией Грина с мнимым временем“. Отметим, что оператор упорядочения во времени T в (14.19) означает, что все операторы расположены в порядке уменьшения τ слева направо.

Причина, по которой функцию \mathcal{S} можно разложить в тот же диаграммный ряд, что и G (для $T=0$), состоит в следующем. Как показано в приложении II, диаграммное разложение для G представляет собой фундаментальное следствие зависящего от времени уравнения Шредингера. Статистический оператор ρ удовлетворяет уравнению Блоха

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = - (H - \mu N) \rho, \quad (14.21)$$

в чем можно убедиться, продифференцировав соотношение (14.3). Между этим уравнением и нестационарным уравнением Шредингера имеется полное соответствие:

$$\Psi \leftrightarrow \rho, \quad H \leftrightarrow H - \mu N, \quad it \leftrightarrow \beta.$$

Это и указывает на то, что, совершив всюду замену (14.20), мы можем построить теорию для конечных температур, основывающуюся на уравнении Блоха, таким же образом, каким на основании уравнения Шредингера была построена теория для температуры $T=0$. При этом, в частности, оказывается, что \mathcal{S} можно разложить в ряд теории возмущений, представляющий собой почти идентичный двойник ряда теории возмущений для функции Грина при нулевой температуре.

¹⁾ Автор употребляет термин „функция Грина с мнимым временем“. При переводе, однако, использовались термины, принятые в отечественной литературе „термодинамическая“ или „мацубаровская“ функция Грина. — *Прим. перев.*

[См. в приложении IV формулы (IV. 14) — (IV. 19) и в приложении V формулы (V. 15) — (V. 17).]

Несмотря на нефизически звучащий термин „мнимое время“, получить физическую информацию из \mathcal{G} так же легко, как и из G^T . Дело, во-первых, в том, что замена $H \rightarrow H - \mu N$ приводит лишь к сдвигу одночастичной энергии на μ , так как

$$H_0 - \mu N = \sum_k (\epsilon_k - \mu) c_k^\dagger c_k.$$

Во-вторых, хотя расчет дает \mathcal{G} как функцию от τ , этот результат всегда можно выразить через реальное время путем замены τ на it , или, говоря более точно, путем аналитического продолжения на ось действительного времени.

Некоторое затруднение вызывает то, что значения τ_1 и τ_2 в выражении (14.19) ограничены интервалом от 0 до β . (Причина этого изложена в приложениях IV и V.) Это создает трудности при переходе к (\mathbf{k}, ω) -пространству, так как при фурье-преобразовании требуется интегрировать по τ от $-\infty$ до $+\infty$. Указанная трудность устраняется, если включить в наш зверинец еще одну функцию Грина $\mathcal{G}_{\text{период}}$. Она получается периодическим повторением \mathcal{G} от $-\infty$ до $+\infty$, т. е.

$$\mathcal{G}_{\text{период}}(\mathbf{k}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n), \quad (14.22)$$

где

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau) d\tau, \quad (14.23)$$

$$\omega_n = \frac{\pi n}{\beta}. \quad (14.24)$$

Функция $\mathcal{G}_{\text{период}}(\mathbf{k}, \tau)$ равна $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \tau)$ в интервале $(-\beta, +\beta)$ и периодически повторяется в интервалах $(+\beta, +3\beta)$, $(+3\beta, +5\beta)$, ..., $(-3\beta, -\beta)$, [Заметим, что разность $\tau = \tau_2 - \tau_1$ заключена в интервале $(-\beta, +\beta)$, так как величины τ_1 и τ_2 пробегают интервал $(0, \beta)$.] Таким образом, фурье-трансформанта функции $\mathcal{G}_{\text{период}}$ есть $\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n)$.

Четные значения n выпадают из ряда для $\mathcal{G}_{\text{период}}$ благодаря так называемому „квазипериодическому“ граничному условию

$$\mathcal{G}_{\text{период}}(\mathbf{k}, \tau) = -\mathcal{G}_{\text{период}}(\mathbf{k}, \tau + \beta) \quad \text{для} \quad \tau < 0. \quad (14.25)$$

Справедливость его легко проверить, воспользовавшись свойством шпура $\text{Sp } AB = \text{Sp } BA$. Полагая $\tau' - \tau > 0$, мы имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{период}}(\mathbf{k}, \tau - \tau') &= \frac{i}{Z} \text{Sp } e^{-\beta(H - \mu N)} c_k^+(\tau') c_k(\tau) = \\ &= \frac{i}{Z} \text{Sp } c_k(\tau) e^{-\beta(H - \mu N)} c_k^+(\tau') = \\ &= \frac{i}{Z} \text{Sp } e^{-\beta(H - \mu N)} \underbrace{e^{+\beta(H - \mu N)} c_k(\tau) e^{-\beta(H - \mu N)}}_{= c_k(\tau + \beta)} c_k^+(\tau'), \quad (14.26) \end{aligned}$$

или

$$\mathcal{E}_{\text{период}}(\mathbf{k}, \tau - \tau') = - \mathcal{E}_{\text{период}}(\mathbf{k}, \tau + \beta - \tau'), \quad (14.27)$$

что при $\tau' = 0$ совпадает с условием (14.25). [Знак минус появился благодаря тому, что операторы $c_k(\tau)$ так же, как и c_k , антикоммутируют друг с другом.] Подставляя соотношение (14.25) в (14.22), видим, что все слагаемые с четными n действительно обращаются в нуль. Таким образом, (14.24) заменяется на

$$\omega_n = \frac{(2n + 1)\pi}{\beta}. \quad (14.28)$$

(В случае бозонов выпадают слагаемые с нечетными n .)

Рассмотрим теперь термодинамическую функцию Грина свободной частицы. Используя определение (14.19) и соотношения (14.15) и (14.16) (где μ_0 заменено на μ), с помощью тех же рассуждений, которые приводят от (9.15) к формуле (9.20), получаем

$$\mathcal{E}_0(\mathbf{k}, \tau_2 - \tau_1) = -i \left[\theta_{\tau_2 - \tau_1} f_k^+ - \theta_{\tau_1 - \tau_2} f_k^- \right] e^{-(\epsilon_k - \mu)(\tau_2 - \tau_1)}. \quad (14.29)$$

Физический смысл этого результата можно понять, сравнив его с обычной функцией Грина (8.34) при $T = 0$. Не считая сдвига начала отсчета энергии на величину μ и замены it на τ , основное различие между этими функциями состоит в том, что вместо функций $\theta_{\epsilon_k - \epsilon_F}$ и $\theta_{\epsilon_F - \epsilon_k}$ появляются статистические множители f_k^+ и f_k^- . Это соответствует размазке θ -функций (фиг. 13). Теперь „дырка“ интерпретируется не просто как состояние под ферми-поверхностью, не занятое частицей, а более общим способом. [См. абзац, следующий за формулой (4.30).] Именно дырке соответствует та часть функции \mathcal{E}_0 , которая отлична от нуля при $\tau_2 < \tau_1$. Поэтому можно утверждать:

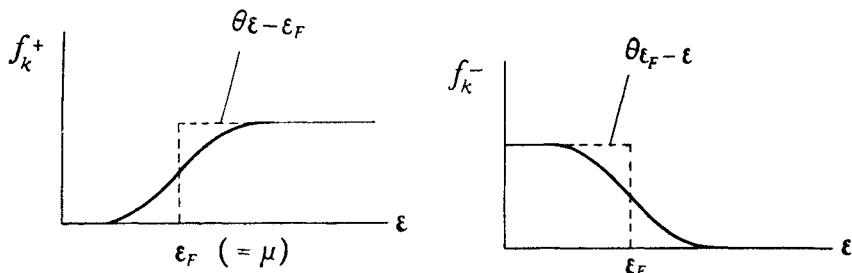
$$\text{При } T > 0 \text{ в состоянии с одним и тем же вектором } \mathbf{k} \text{ могут одновременно находиться и электрон и дырка.} \quad (14.30)$$

Если теперь периодически продолжить функцию \mathcal{G}_0 (индекс „период“ с этого момента мы будем опускать) на все значения τ , то, подставив выражение (14.29) в (14.23), получим

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{i}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu}, \quad (14.31)$$

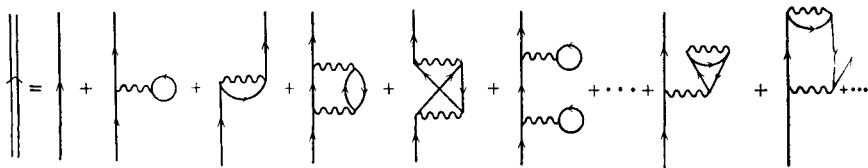
где ω_n определяется равенством (14.28).

Как показано в п. 3 приложения V, функцию \mathcal{G} можно разложить в ряд теории возмущений, который оказывается



Фиг. 13. Статистические множители частицной (f_k^+) и дырочной (f_k^-) частей термодинамической функции Грина.

близнецом соответствующего ряда для G при нулевой температуре. Отсюда следует, что \mathcal{G} выражается с помощью тех же диаграмм, что и G :



$$(14.32)$$

Теперь, однако, согласно утверждению (14.30), следует учитывать и „аномальные“ диаграммы (см. стр. 185). Правила вычисления этих диаграмм в случае конечных температур приведены в словаре табл. 13. [Относительно того, почему в этом случае перед V опускается мнимая единица i , см. в приложении IV формулы (IV. 13) и (IV. 19).]

Уравнение Дайсона для \mathcal{G} в диаграммном виде в точности совпадает с (10.7), так что

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{i}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)}. \quad (14.33)$$

Простейшим примером служит приближение Хартри – Фока при конечной температуре. Ему отвечает неприводимая собственно-энергетическая часть Σ , представленная диаграммами (10.11). Расчет с помощью табл. 13 дает

$$\begin{aligned}
 -\Sigma(\mathbf{k}, \omega_n) &= \text{---}\bigcirc\text{---} \mathbf{p} + \text{---}\bigcirc\text{---} = \\
 &= - \sum_{\mathbf{p}} (V_{k\rho k\rho} - V_{\rho k k\rho}) f_{\rho}^{-}. \quad (14.34)
 \end{aligned}$$

Подставляя это в выражение (14.33), видим, что при конечной температуре мы имеем дело с хартри-фоковскими квази-частицами с энергией

$$\epsilon'_k = \epsilon_k + \sum_{\text{по всем } \rho} (V_{k\rho k\rho} - V_{\rho k k\rho}) (e^{\beta(\epsilon_{\rho} - \mu)} + 1)^{-1}. \quad (14.35)$$

Эффективное поле, которое „видит“ частица с импульсом \mathbf{k} , модифицируется теперь за счет того, что при конечной температуре некоторые из создающих его частиц находятся выше поверхности Ферми. Это обстоятельство отражается фигурирующим в формуле (14.35) статистическим множителем. Таким образом, энергии квазичастиц оказываются зависящими от температуры через множитель $\beta = 1/kT$ – хороший пример довольно странно звучащей в квантовой механике концепции: „температурно зависящие энергетические уровни“. (Истинные уровни системы от температуры, конечно, не зависят.)

Приведенное выше выражение можно сделать „самосогласованным“, заменив в правой части формулы (14.35) ϵ_{ρ} на ϵ'_{ρ} и превратив его тем самым в запутанное уравнение для ϵ'_{ρ} . Графически это означает, что из разложения (11.3) для неприводимой собственно-энергетической части мы оставляем только два первых слагаемых:

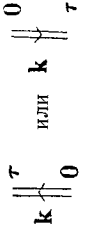
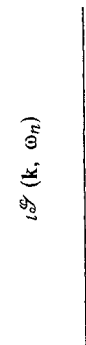
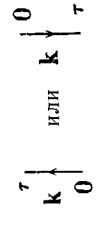
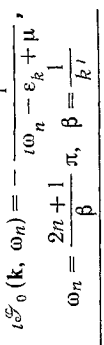
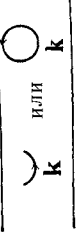
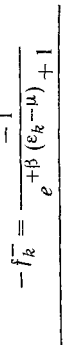
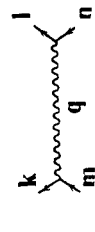

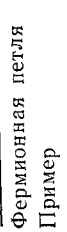



$$\bigcirc_{\Sigma} \approx \text{---}\bigcirc\text{---} + \text{---}\bigcirc\text{---} \quad (14.36)$$

§ 4. Вакуумная амплитуда при конечной температуре

Вакуумная амплитуда при нулевой температуре определялась соотношением

$$R(t) = \langle \Phi_0 | U(t) | \Phi_0 \rangle e^{iW_0 t}. \quad (14.37)$$

Диаграммный словарь для системы взаимодействующих фермионов при конечной температуре в отсутствие внешнего поля

(k, τ)-пространство	(k, ω _n) пространство
<p>Элемент диаграммы</p> <p>Множитель</p>	<p>Элемент диаграммы</p> <p>Множитель</p>
 <p>или</p>  <p>или</p>	$i\mathcal{S}(k, \tau)$ <p>или</p> $i\mathcal{S}(k, \omega_n)$
 <p>или</p>  <p>или</p>	$i\mathcal{S}_0(k, \tau) = [\theta_{\tau} f_k^+ - \theta_{-\tau} f_k^-] \times$ $\times e^{-(\varepsilon_k - \mu)\tau}$ <p>или</p> $i\mathcal{S}_0(k, \omega_n) = -\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu},$ $\omega_n = \frac{2n+1}{\beta} \pi, \beta = \frac{1}{kT}$
 <p>или</p>  <p>или</p>	$-f_k^- = \frac{-1}{e^{+\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1}$ <p>или</p> $-f_k^+ = \frac{-1}{e^{+\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1}$
 <p>или</p>  <p>или</p>	$-V_{klmn}$
<p>Фермионная петля</p> <p>Пример</p> 	<p>Фермионная петля</p> <p>Пример</p> 
	
<p>Промежуточные k, τ</p> $\sum_k \int_0^{\beta} d\tau$	<p>Промежуточные k, ω_n</p> $\sum_k \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty}$

Теперь для наших целей требуется явное выражение для амплитуды, в котором используется оператор \tilde{U} [см. приложение V, формула (V.13)] при $t_0 = 0$:

$$R(t) = \langle \Phi_0 | \tilde{U}(t) | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | e^{iH_0 t} e^{-iHt} | \Phi_0 \rangle. \quad (14.38)$$

Здесь использовано соотношение (IV.1) из приложения IV.

Вакуумная амплитуда при конечной температуре определяется формулой

$$R^T = \langle \tilde{U}(t) \rangle_0, \quad (14.39)$$

где символ $\langle \rangle_0$ обозначает усреднение по ансамблю *не-взаимодействующих* частиц при температуре T . Эта величина, как и функция G^T [см. (14.18)], не очень удобна. Более подходящей оказывается функция, которая получается из R^T с помощью преобразования (14.20):

$$\mathcal{R}(\beta) = \langle \tilde{U}(\beta) \rangle_0 = \langle e^{\beta(H_0 - \mu N)} e^{-\beta(H - \mu N)} \rangle_0. \quad (14.40)$$

Отметим тут же, что статистическая сумма оказывается пропорциональной $\mathcal{R}(\beta)$. В самом деле,

$$\begin{aligned} Z &= \text{Sp } e^{-\beta(H - \mu N)} = \text{Sp } e^{-\beta(H_0 - \mu N)} \tilde{U}(\beta), \\ Z_0 &= \text{Sp } e^{-\beta(H_0 - \mu N)}, \end{aligned} \quad (14.41)$$

так что

$$\frac{Z}{Z_0} = \langle \tilde{U}(\beta) \rangle_0 = \mathcal{R}(\beta). \quad (14.42)$$

Следовательно, согласно соотношению (14.7), среднюю энергию системы можно легко представить в виде

$$\langle E \rangle = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_0 - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{R}(\beta). \quad (14.43)$$

Ясно, что это есть доказанный при $T \neq 0$ аналог теоремы (5.4):

$$E_0 = W_0 + i \left[\frac{d}{dt} \ln R(t) \right]_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)}. \quad (14.44)$$

Как показано в приложении V [формула (V.19)], функцию $\mathcal{R}(\beta)$ можно разложить в ряд, подобный ряду для $R(t)$ при $T = 0$. Это означает, что вид диаграммного разложения,

соответствующего $T > 0$, остается прежним:

$$\mathcal{R}(\beta) = 1 +$$

$$+ \dots \quad (14.45)$$

Заметим, что сюда следует включить и аномальные диаграммы. Приведем примеры вычисления диаграмм с использованием табл. 13:

$$k \text{---} \text{---} \text{---} l = (-1)^2 \int_0^\beta d\tau \sum_{k,l} (-V_{klkl}) (-f_k^-) (-f_l^-), \quad (14.46)$$

$$k \begin{array}{c} | \\ \text{---} \\ | \end{array} k = (-1)^2 \sum_{k,l} (-V_{kllk}) (-V_{lkkl}) f_k^+ (-f_k^-) (-f_l^-)^2 \times$$

$$\times \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 e^{-(\epsilon_k - \epsilon_l)(\tau_2 - \tau_1)} \theta_{\tau_2 - \tau_1}. \quad (14.47)$$

Разложение для средней энергии $\langle E \rangle$ можно получить из (14.45) с помощью соотношения (14.43). Здесь опять оказывается справедливой теорема о разложении по связанным группам, и мы имеем

$$\langle E \rangle = \langle E \rangle_0 +$$

$$+ \dots \quad (14.48)$$

Для вычисления этого ряда требуется новый словарь. За деталями и примерами мы отсылаем читателя к работе [7].

Литература для дальнейшего чтения:

Шульц [60],
 Таулес [64],
 Латтинджер, Уорд [40],
 Абрикосов, Горьков, Дзялошинский [1],
 Блох [7].

● *Упражнения*

1. Выразите среднее число частиц \bar{N} через статистическую сумму.
2. Используя результат упражнения 1, выразите химический потенциал μ_0 ферми-системы без взаимодействия при температуре T через среднее число частиц (по условию равно N_0).
3. Проверьте справедливость выражения (14.29).
4. Проверьте справедливость выражения (14.31).
5. Переведите на язык температурных функций [в (\mathbf{k}, ω_n) -пространстве] четвертую диаграмму разложения (14.32).

ДИАГРАММНЫЙ МЕТОД В ТЕОРИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

§ 1. Введение

Хорошо известно, что ниже некоторой критической температуры $T_{кр} \sim 1 \div 10^\circ \text{К}$ большое число металлов и сплавов претерпевает переход в новую фазу, называемую сверхпроводящим состоянием (см. обзоры [56, 66] ¹⁾). Эффективные физические свойства этого состояния, такие, как нулевое электрическое сопротивление и идеальный диамагнетизм, поставили явление сверхпроводимости на одно из центральных мест в современной теории многих тел.

Как теперь известно, механизмом, ответственным за возникновение сверхпроводимости, является притяжение между двумя электронами, возникающее вследствие обмена „виртуальными фононами“. В результате этого притяжения электроны с противоположными спинами и импульсами *спариваются*. Волновая функция основного состояния такой системы представляет собой суперпозицию „незацепляющихся“ друг за друга функций, как, например, $|0_{k_1\uparrow}, 0_{-k_1\downarrow}, 1_{k_2\uparrow}, 1_{-k_2\downarrow}, \dots\rangle$, при этом пары одночастичных состояний $\phi_{+k\uparrow}, \phi_{-k\downarrow}$ либо заняты, либо пусты. Оказывается, что если учесть такое спаривание, то закон дисперсии элементарных возбуждений („боголонов“) имеет вид

$$E_k = \left[\left(\frac{k^2}{2m^*} - \varepsilon_F \right)^2 + \Delta^2 \right]^{1/2},$$

а не $E_k = k^2/2m^* - \varepsilon_F$, как для свободных частиц. Таким образом, спектр возбуждений системы имеет „энергетическую щель“ Δ . Это и делает сверхпроводник невосприимчивым к тому рассеянию, которое обуславливает электрическое сопротивление нормального металла.

¹⁾ См. также [80]. — *Прим. ред.*

Существует несколько способов вычисления энергии основного и возбужденных состояний сверхпроводника E_0 и E_k . Самый первый способ Бардина, Купера и Шриффера (БКШ), который будет бегло нами описан, основывается на вариационном методе решения уравнения Шредингера для системы электронов с мгновенным притягивающим взаимодействием. (Истинное взаимодействие оказывается запаздывающим.) Величины E_0 и E_k можно получить и диаграммным методом, и именно на этом мы сосредоточим здесь свое внимание.

Диаграммный метод, пригодный для описания сверхпроводимости, отличается от того, который мы до сих пор использовали. Сначала мы покажем, что обычные диаграммные методы при всей их мощи не имеют достаточно сильных мышц, чтобы осилить случай сверхпроводимости. В самом деле, мы увидим, что из-за спаривания электронов обычная диаграммная теория возмущений оказывается совершенно неприменимой.

Из этого трагического положения существует несколько эквивалентных выходов. Один из них, описанный ниже, использует *матричную функцию Грина* $\mathbb{G}(\mathbf{k}, \omega)$, которая уже содержит в себе спаривание. Эта функция имеет вид

$$\mathbb{G} = \begin{pmatrix} G(\mathbf{k}\uparrow) & F \\ F^\dagger & -G(-\mathbf{k}\downarrow) \end{pmatrix}, \quad (15.1)$$

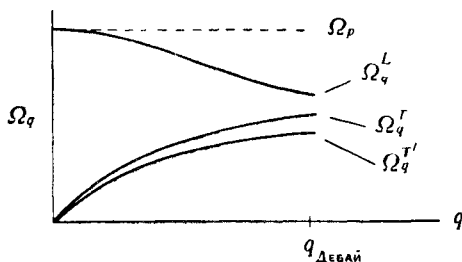
где G — обычная функция Грина, а F — так называемая *аномальная функция Грина*, определяющая амплитуду вероятности рождения или уничтожения пары частиц в системе. Матричную функцию Грина \mathbb{G} , подобно обычной функции Грина G , можно представить в виде бесконечного ряда диаграмм и с ее помощью найти энергию боголона E_k .

Преимущество диаграммного метода в теории сверхпроводимости заключается в том, что он позволяет учитывать запаздывающий характер межэлектронного взаимодействия, обусловленного фононами. Это дает возможность браться за решения задач, недоступных обычному методу БКШ, и создает основу для значительно более общей формулировки теории сверхпроводимости.

§ 2. Гамильтониан системы взаимодействующих электронов и фононов

В рассмотренных до сих пор примерах мы использовали утопическую модель металла, представляющего собой ящик, в котором на фоне размазанного статического положитель-

ного заряда (соответствующего положительным ионам) движутся электроны. Для наших нынешних целей эта модель слишком идеализирована. Для объяснения сверхпроводимости следует принять во внимание, что образующие кристаллическую решетку положительные ионы могут колебаться относительно своих положений равновесия. Таким образом, в наш



Фиг. 14. Закон дисперсии для продольных и поперечных мод голых фононов.

ящик необходимо ввести еще кванты колебаний решетки — *фононы*.

Гамильтониан системы невзаимодействующих фононов имеет вид [см. (1.41)]

$$H = \sum_q \Omega_q \left(B_q^\dagger B_q + \frac{1}{2} \right) \quad (\hbar = 1), \quad (15.2)$$

где Ω_q — частота фонона с импульсом \mathbf{q} и поляризацией λ ($q \equiv \mathbf{q}, \lambda$), а B_q^\dagger и B_q — операторы рождения и уничтожения фонона. Грубо говоря, фононы описывают одно „продольное“ колебание с частотой Ω_q^L и два „поперечных“ с частотами Ω_q^T и $\Omega_q^{T'}$. Воспользуемся моделью, в которой положительные ионы решетки, взаимодействующие друг с другом посредством кулоновских сил, колеблются на фоне статического отрицательного заряда, соответствующего электронам (это не то же самое, что модель „пружинок“ на фиг. 2, так как кулоновские силы имеют дальнедействующий характер!). Пренебрегая при этом взаимодействием ионов с электронами, мы получаем частоты, представленные на фиг. 14, где $q_{\text{Дебай}} \sim 1 \text{ \AA}^{-1}$.

Частота

$$\Omega_q = \sqrt{\frac{4\pi Z^2 e^2 N}{M}}, \quad (15.3)$$

где Ze — заряд иона, N — число ионов в 1 см^3 , M — масса иона, есть ионная „плазменная“ частота. Она равна собственной частоте колебаний ионов, которой они обладали бы, будучи размазаны в виде желе на фоне однородного статического отрицательного заряда (модель „желе“). Тот факт, что $\Omega_q^L \rightarrow \Omega_p$ при $q \rightarrow 0$, физически неправилен: надо было бы получить, что $\Omega_q^L \rightarrow 0$ при $q \rightarrow 0$. Ошибка связана с пренебрежением взаимодействием с электронами. Учет последнего приводит к „одеванию“ продольных фононов электронным облаком; при этом их частоты перенормируются так, что $\Omega_q \sim q$ при малых q (приложение X).

Пусть теперь электроны и фононы в нашем ящике взаимодействуют друг с другом. Тогда гамильтониан системы в пренебрежении фонон-фононным взаимодействием принимает вид

$$H = H_{\text{своб. электронов}} + H_{\text{кулон}} + H_{\text{своб. фононов}} + H_{\text{электрон-фононный}}, \quad (15.4)$$

где

$$H_{\text{своб. электронов}} = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k, \sigma}^\dagger c_{k, \sigma}, \quad (15.5)$$

$$H_{\text{кулон}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k, k', K \\ \sigma, \sigma'}} V_{K} c_{k'-K, \sigma'}^\dagger c_{k+K, \sigma}^\dagger c_{k, \sigma} c_{k', \sigma'}, \quad (15.6)$$

$$H_{\text{своб. фононов}} = \sum_q \Omega_q \left(B_q^\dagger B_q + \frac{1}{2} \right), \quad (15.7)$$

$$H_{\text{электрон-фононный}} = \sum_{k, k', q} g_q [B_q + B_{-q}^\dagger] c_{k', \sigma}^\dagger c_{k, \sigma}. \quad (15.8)$$

Вывод гамильтониана взаимодействия (15.8) читатель может найти в книгах [58, 60]¹⁾. Мы написали этот гамильтониан, используя модель желе, в которой электроны взаимодействуют только с продольными фононами и

$$g_q = \frac{4\pi e^2}{q} \sqrt{\frac{Z^2 N}{2\Omega_p M}}, \quad (15.9)$$

а частота Ω_p дается формулой (15.3). Гамильтониан (15.8) описывает процесс, в котором электрон, испуская или поглощая фонон с волновым вектором q , рассеивается из состояния k в k' .

¹⁾ См. также [81]. — Прим. ред.

§ 3. Краткий обзор теории БКШ ¹⁾

А. ГАМИЛЬТОНИАН БКШ

Глупо было бы надеяться, что достаточно долгое созерцание гамильтониана (15.4) может само по себе привести к разгадке секрета сверхпроводимости. Ключ к ней нужно взять у природы. Некоторые из важных наводящих соображений следуют из эксперимента [43]:

1. Сверхпроводимость встречается у чрезвычайно разнообразных металлов и сплавов.

2. Характерная для сверхпроводящей фазы энергия связи очень мала и составляет величину порядка 10^{-4} эв/атом.

3. Явление сверхпроводимости связано с электронами в тонком слое вблизи поверхности Ферми. Толщина этого слоя порядка $kT_{кр}$, где $T_{кр}$ — температура перехода в сверхпроводящее состояние ($\sim 1 \div 10^\circ$ К). Эти электроны называют „сверхпроводящими“.

4. Движение электронов, отстоящих друг от друга на расстояниях порядка или меньше „длины когерентности“ ($\sim 10^{-4}$ см), оказывается сильно коррелированным.

5. Изотопический эффект, состоящий в том, что температура $T_{кр}$ оказывается обратно пропорциональной корню из массы иона решетки, указывает на огромную роль, которую играет в сверхпроводимости электрон-фононное взаимодействие.

Из п. 1 видно, что детали структуры металла не играют определяющей роли в сверхпроводимости. Это означает, что в первом приближении мы можем пренебречь периодическим потенциалом решетки и связанными с ним искажениями ферми-сферы. Мы видели, что кулоновское отталкивание между электронами обуславливает лишь нормальное квази-частичное поведение. Таким образом, согласно п. 5, мы ищем такое взаимодействие между электронами через фононы, которое могло бы привести к появлению нового типа корреляции, указанной в п. 4. Физически такое взаимодействие могло бы быть следствием того, что а) один электрон втягивает в свою окрестность положительный ион и деформирует решетку, рождая тем самым фононы [это и есть электрон-фононное взаимодействие (15.8)], и б) эта деформация действует на второй электрон, т. е. последний поглощает фонон. Поскольку это взаимодействие проявляется во втором порядке, оно не присутствует в явном виде в гамильто-

¹⁾ См. гл 4 в работе [56].

ниане (15.4). Однако Фрелих [20] показал, что его можно выделить с помощью некоторого сложного канонического преобразования гамильтониана H (см. [34] или [57]). В результате преобразования получаем

$$H_{\text{пр-образ}} = H_{\text{квази-электронный}} + H_{\text{экраниро-ванный кулон.}} + H_{\text{электрон-фонон-электронный}} + H_{\text{одетых фононов}} + \dots, \quad (15.10)$$

где

$$H_{\text{квазиэлектронный}} = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k, \sigma}^{\dagger} c_{k, \sigma} \quad \left(\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \epsilon_F \right), \quad (15.11)$$

$$H_{\text{одетых фононов}} = \sum_k \hbar \omega_k \left(B_k^{\dagger} B_k + \frac{1}{2} \right),$$

$$H_{\text{Экран.кулон+электрон-фонон-электронный}} = \sum_{k, k', q, \sigma, \sigma'} \mathcal{V}_{kq} c_{k'-q, \sigma}^{\dagger} c_{k+q, \sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} c_{k'\sigma'}, \quad (15.12)$$

причем потенциал *БКШ-взаимодействия* \mathcal{V}_{kq} определяется соотношением

$$\mathcal{V}_{kq} = V_{k+q, k'-q} \quad k, k' = \underbrace{\frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2}}_{\text{Экранированное кулоновское взаимодействие}} + \underbrace{\frac{2\hbar\omega_q |M_q|^2}{(\epsilon_k - \epsilon_{k+q})^2 - (\hbar\omega_q)^2}}_{\text{Экранированное электрон-фонон-электронное взаимодействие (взаимодействие Фрелиха)}}. \quad (15.13)$$

Плазмонное слагаемое здесь опущено, так как оно нас не интересует. В выражении (15.11) подразумевается, что электронная энергия перенормирована с учетом вклада взаимодействия (15.12) в первом порядке. Таким образом, новая величина ϵ_k есть энергия квазиэлектрона в приближении Хартри — Фока. Для простоты мы будем предполагать, что ее можно выразить через эффективную массу m^* . Отметим, что энергия отсчитывается от уровня Ферми. Матричный элемент M_q пропорционален экранированной константе электрон-фононной связи, а ω_k есть частота продольного фонона, перенормированная за счет взаимодействия с электронами (см. приложение X).

Исследуем подробнее потенциал БКШ-взаимодействия \mathcal{V}_{kq} . Среднее значение $\hbar\omega_q$ составляет величину порядка 0,025 эв,

в то время как среднее значение разности $\epsilon_k - \epsilon_{k+q}$ для электронов в тонком слое у поверхности Ферми — порядка $4 \cdot 10^{-4}$ эв (см. п. 3). Стало быть, в среднем фрелиховское слагаемое в \mathcal{V}_{kq} отрицательно (что соответствует притяжению между электронами). Далее в металлах, которые всегда остаются нормальными, матричный элемент M_q электрон-фононного взаимодействия мал и доминирует кулоновское отталкивание. Поэтому потенциал БКШ-взаимодействия оказывается положительным и электроны отталкиваются друг от друга. Однако в сверхпроводящих металлах (т. е. таких, которые переходят в сверхпроводящее состояние при достаточно низких температурах) матричный элемент M_q велик, так что преобладает фрелиховское слагаемое и потенциал БКШ-взаимодействия оказывается отрицательным. Это означает, что в сверхпроводниках между всеми электронами внутри тонкого слоя вблизи поверхности Ферми действуют силы притяжения. (Заметим, что в сверхпроводниках эти силы притяжения присутствуют всегда независимо от того, перешел ли металл в сверхпроводящее состояние или нет.)

Б. СПАРИВАНИЕ И РЕДУЦИРОВАННЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Купер исследовал, к чему приводит такое притяжение. Его результат состоит в следующем. Рассмотрим два электрона с волновой функцией, соответствующей суперпозиции двухчастичных состояний $|1_{k\uparrow}, 1_{-k\downarrow}\rangle$ (\uparrow и \downarrow означают направление спина вверх и вниз, а $|k| > k_F$). При наличии притяжения они образуют связанное состояние независимо от того, сколь мало взаимодействие. Волновая функция связанного состояния имеет характерные размеры порядка 10^{-4} см и энергия этих электронов оказывается меньше той, которой они обладали бы в отсутствие взаимодействия. Следовательно, указанное притяжение приводит к неустойчивости распределения Ферми: системе, оказывается, энергетически более выгодно образовать некоторое коррелированное состояние, в котором каждый электрон в состоянии $k\uparrow$ „спарен“ со своим товарищем в состоянии $-k\downarrow$ (куперовская пара).

Понятие „спаривание“ достаточно ясно для двух электронов. Однако, что это означает для N электронов? БКШ предположили, что волновая функция Ψ_0 основного состояния сверхпроводника не есть более линейная комбинация всех волновых функций невзаимодействующей системы $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$, а образуется из волновой функции со-

стояний, в которых электроны содержатся только в куперовских парах:

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{\dots n_{k_1\uparrow}, n_{-k_1\downarrow}, \dots} A \dots n_{k_1\uparrow}, n_{-k_1\downarrow}, \dots | \dots n_{k_1\uparrow}, n_{-k_1\downarrow}, \dots \rangle, \quad (15.14)$$

где $n_{k_1\uparrow} = n_{-k_1\downarrow}$ для всех k_i . Это можно записать в сокращенной форме

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{\dots, N_i, \dots} A \dots, N_i, \dots | N_1, \dots, N_i, \dots \rangle, \quad N_i = 0, 1, \quad (15.15)$$

где $|N_1, \dots, N_i, \dots\rangle$ означает следующее: N_1 пар в состоянии $\mathbf{k}_1\uparrow, -\mathbf{k}_1\downarrow$, N_2 пар в состоянии $\mathbf{k}_2\uparrow, -\mathbf{k}_2\downarrow$ и т. д. (Можно заметить, что это предположение о парах неочевидно и, по словам Купера, „глубоко загадочно“.)

Если ограничиться волновой функцией $|\Psi_0\rangle$ такого типа, то можно видеть, что в матричных элементах гамильтониана H , (15.12), между двумя состояниями $|N_1, \dots, N_i, \dots\rangle$ отличными от нуля оказываются только те слагаемые, в которых операторы $c_{k\sigma}^\dagger, c_{k\sigma}$ также встречаются в виде пар. Это позволяет нам отбросить все остальные слагаемые и записать гамильтониан (15.11) и (15.12) в „редуцированной“ или „парной“ форме:

$$H_{\text{ред}} = 2 \sum_k \varepsilon_k b_k^\dagger b_k - \sum_{kk'} V_{kk'} b_{k'}^\dagger b_k \quad (V_{kk'} \equiv V_{-k', k', -k, k}), \quad (15.16)$$

где операторы пар

$$b_k^\dagger = c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \quad \text{и} \quad b_k = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}, \quad (15.17)$$

действуя на состояние $|N_1, \dots, N_i, \dots\rangle$, рождают или уничтожают куперовские пары. Отметим, что вид первого слагаемого в гамильтониане (15.16) обосновывается тем, что его действие на волновую функцию пары приводит к тому же результату, что и действие оператора (15.11).

в. СВЕРХПРОВОДНИК ИЗ ДВУХ ЧАСТИЦ

Волновая функция основного состояния $|\Psi_0\rangle$ сверхпроводника должна удовлетворять уравнению Шредингера

$$H_{\text{ред}} |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle. \quad (15.18)$$

Прежде чем сформулировать результат решения этого уравнения, полученный БКШ, имеет смысл рассмотреть тривиальный случай „сверхпроводника из двух частиц“, что поможет

нам разобраться в том, каким образом отрицательное слагаемое в $H_{\text{ред}}$ приводит к коррелированному основному состоянию (п. 4) с энергией, лежащей несколько ниже энергии нормального состояния (п. 2). Пусть имеются два электрона и шесть волновых состояний, каждому из которых отвечает энергия ϵ_0 :

$$\overline{k_{1\uparrow}} \quad \overline{-k_{1\downarrow}} \quad \overline{k_{2\uparrow}} \quad \overline{-k_{2\downarrow}} \quad \overline{k_{3\uparrow}} \quad \overline{-k_{3\downarrow}} \quad \epsilon_0. \quad (15.19)$$

Пусть далее $V_{kk'} = V$ (константа). Тогда

$$H_{\text{ред}} = 2\epsilon_0 \sum_k b_k^\dagger b_k - V \sum_{kk'} b_{k'}^\dagger b_k. \quad (15.20)$$

В отсутствие взаимодействия ($V = 0$) волновая функция и собственные значения энергии в обозначениях (15.15) суть

$$|\Phi_1\rangle = |1_{k_1}, 0, 0\rangle, \quad |\Phi_2\rangle = |0, 1_{k_2}, 0\rangle, \quad |\Phi_3\rangle = |0, 0, 1_{k_3}\rangle, \quad (15.21)$$

$$E_1 = 2\epsilon_0, \quad E_2 = 2\epsilon_0, \quad E_3 = 2\epsilon_0.$$

„Сверхпроводящему“ состоянию, согласно (15.15), отвечает волновая функция

$$|\Psi\rangle = A_1 |1_{k_1}, 0, 0\rangle + A_2 |0, 1_{k_2}, 0\rangle + A_3 |0, 0, 1_{k_3}\rangle. \quad (15.22)$$

Задача легко решается, если ввести матричные обозначения, используя в качестве базиса волновые функции нормального состояния. Тогда

$$\langle \Phi_i | 2\epsilon_0 \sum_k b_k^\dagger b_k | \Phi_j \rangle = 2\epsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (15.23)$$

$$\langle \Phi_i | -V \sum_{k, k'} b_{k'}^\dagger b_k | \Phi_j \rangle = -V \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15.24)$$

Таким образом, матричное уравнение Шредингера (15.18) принимает вид

$$\left[2\epsilon_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - V \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}, \quad (15.25)$$

и собственные значения оказываются равными

$$E = 2\epsilon_0, \quad 2\epsilon_0, \quad 2\epsilon_0 - 3V. \quad (15.26)$$

Видно, что последнее собственное значение энергии на $3V$ меньше, чем энергия нормального состояния, — это и есть

энергия „сверхпроводящего“ состояния Соответствующая ему волновая функция есть

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|1_{k_1}, 0, 0\rangle + |0, 1_{k_2}, 0\rangle + |0, 0, 1_{k_3}\rangle]. \quad (15.27)$$

Ясно, что в этом состоянии электроны в высшей степени коррелированы: во-первых, они всегда спарены и, во-вторых, три возможные волновые функции образуют смесь с равными весами 1 : 1 : 1.

Г. РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ПО МЕТОДУ БКШ

Чтобы решить уравнение (15.18) для реального сверхпроводника, содержащего N частиц, БКШ предположили, что взаимодействие $V_{kk'}$ в гамильтониане (15.16) имеет простой вид

$$V_{kk'} = \begin{cases} V \text{ (постоянное), если } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \text{ лежат в слое вблизи поверхности Ферми таким, что } (-\hbar\omega_c) < \epsilon_k, \epsilon_{k'} < +\hbar\omega_c, \\ 0 \text{ вне этого слоя} \end{cases} \quad (15.28)$$

Величина $\hbar\omega_c$ представляет собой среднюю энергию фонона $\sim 10^{-2}$ эв. Оказалось, что в этом случае хорошим приближением для волновой функции основного состояния служит выражение (см [56])

$$|\Psi_0\rangle = \prod_k (u_k + v_k b_k^\dagger) |0\rangle, \quad (15.29)$$

где

$$u_k = \sqrt{1 - v_k^2}.$$

Например, в случае только одного парного состояния

$$|\Psi_0\rangle = u_1 u_2 |0_1, 0_2\rangle + u_1 v_2 |0_1, 1_2\rangle + v_1 u_2 |1_1, 0_2\rangle + v_1 v_2 |1_1, 1_2\rangle. \quad (15.29a)$$

Величина v_k есть амплитуда вероятности того, что состояние пары $\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow$ занято. Она дается выражением

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_k}{E_k} \right], \quad (15.30)$$

где

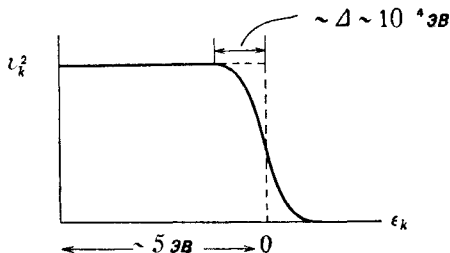
$$E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}, \quad (15.31)$$

$$\Delta \text{ (при малых } V) = \begin{cases} 2\hbar\omega_c \exp\left[-\frac{1}{N(0)V}\right] & \text{для } \mathbf{k} \text{ в слое,} \\ 0 & \text{для } \mathbf{k} \text{ вне слоя.} \end{cases} \quad (15.32)$$

Здесь $N(0)$ — плотность состояний на поверхности Ферми.

Зависимость величины v_k^2 от ϵ_k представлена на фиг. 15. Так как v_k^2 есть как раз вероятность заполнения состояния $k\uparrow$ (или $-k\downarrow$), мы видим, что вблизи энергии Ферми нет никакого разрыва, т. е. поверхности Ферми в сверхпроводнике не существует (см. гл. 11).

Следует отметить, что волновая функция (15.29) представляет собой смесь состояний с 0, 2, 4, 6, ..., $N-2$, N , $N+2$, $N+4$, ... частицами, так что N не является здесь хорошим квантовым числом. Физически это неправильно.



Фиг 15 Вероятность заполнения голы частицей состояния с энергией ϵ_k в основном состоянии сверхпроводника

Однако, используя соотношения (15.30) — (15.32), можно показать, что главный вклад в $|\Psi_0\rangle$ дают только те компоненты (15.29), которым соответствуют числа частиц, крайне близкие к N , а вклад других компонент очень мал, так что здесь не возникает никаких неприятностей.

Для энергии основного состояния при малых V БКШ получили следующее выражение:

$$E_0 = E_0 \text{ (нормальной фазы)} - 2N(0) (\hbar\omega_c)^2 \exp\left[-\frac{2}{N(0)V}\right]. \quad (15.33)$$

Таким образом, в результате притягивающего взаимодействия энергия понижается.

Д. РЕШЕНИЕ ДЛЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ БОГОЛОНЫ

Возбужденные состояния системы можно найти путем диагонализации $H_{ред}$ с помощью канонического преобразования Боголюбова — Валатина. Последнее определяется следующим образом:

$$\alpha_k^+ = u_k c_{k\uparrow}^+ - v_k c_{-k\downarrow}, \quad \beta_k^+ = u_k c_{-k\downarrow}^+ + v_k c_{k\uparrow}, \quad (15.34)$$

$$c_{k\uparrow} = u_k \alpha_k + v_k \beta_k^+, \quad c_{-k\downarrow} = u_k \beta_k - v_k \alpha_k^+. \quad (15.35)$$

Подставляя эти выражения в $H'_{\text{ред}}$ [где первое слагаемое заменено на (15.11)] и используя (15.30), (15.31), получаем после некоторых преобразований

$$H'_{\text{ред}} = E_0 + \sum_k E_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k) + \text{Малые слагаемые.} \quad (15.36)$$

Сравнивая этот результат с формулами (1.43) и (1.44), видим, что мы имеем здесь дело с совокупностью почти независимых элементарных возбуждений. Они называются *боголюбовскими квазичастицами* или *боголонами* (см. § 3 гл. 1). Операторы числа таких квазичастиц суть $\alpha_k^\dagger \alpha_k$ и $\beta_k^\dagger \beta_k$, а их энергии определяются формулой (15.31)

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \varepsilon_F\right)^2 + \Delta_k^2}. \quad (15.37)$$

Важно понять смысл операторов α_k^\dagger и β_k^\dagger . Согласно (15.34), α_k^\dagger рождает боголон с импульсом \mathbf{k} и спином \uparrow (так как оператор $c_{-\mathbf{k}\downarrow}$ удаляет из системы частицу с импульсом $-\mathbf{k}$ и спином \downarrow , что эквивалентно добавлению частицы в состояние $\mathbf{k}\uparrow$). Аналогично оператор β_k^\dagger рождает боголон с импульсом $-\mathbf{k}$ и спином \downarrow . Энергии (15.37) отвечает собственное состояние с одним боголоном

$$|1_{\mathbf{k}\uparrow}\rangle = \alpha_k^\dagger |\Psi_0\rangle \quad (15.38)$$

или

$$|1_{-\mathbf{k}\downarrow}\rangle = \beta_k^\dagger |\Psi_0\rangle. \quad (15.39)$$

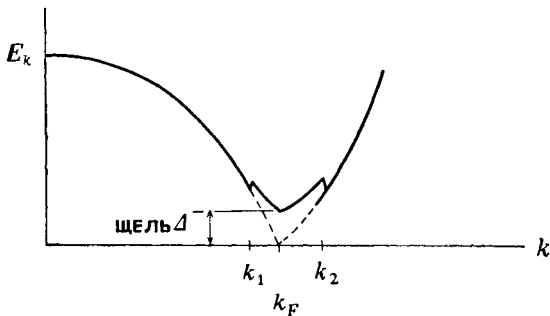
Таким образом, основное состояние $|\Psi_0\rangle$ сверхпроводника ведет себя подобно „вакууму“ для боголонов. (Дальнейшую дискуссию см. в книге [58].)

Закон дисперсии боголонов имеет *энергетическую щель* на поверхности Ферми, равную Δ (фиг. 16). Кривая, изображенная на фигуре, построена, согласно выражению (15.37), с щелью Δ_k , определяемой соотношением (15.32). Величины k_1 и k_2 представляют собой внутренний и внешний радиусы введенного в (15.28) слоя вблизи поверхности Ферми. Разрывы, появляющиеся в точках k_1 и k_2 , обусловлены предположением, принятым в (15.28). Их нельзя рассматривать как реальные физические эффекты! Отметим, что в случае нормального металла ($\Delta_k = 0$)

$$E_k = |\varepsilon_k| = \left| \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \varepsilon_F \right|.$$

Символ абсолютного значения используется здесь потому, что удаление электрона из-под поверхности Ферми с $\varepsilon_k < 0$ приводит к увеличению энергии системы.

Из фиг. 16 ясно, что если в нормальном металле для возбуждения квазиэлектрона на поверхности Ферми требуется нулевая энергия, то в сверхпроводнике для возбуждения боголона необходима минимальная энергия Δ ($\Delta \sim kT_c \sim 10^{-4}$ эв). Именно это обстоятельство и обуславливает удивительную



Фиг. 16. Закон дисперсии боголонов (все очень преувеличено!).
Сплошная кривая — сверхпроводник; пунктирная кривая — нормальный металл.

устойчивость сверхпроводящего состояния относительно рассеяния электронов, приводящего к возникновению сопротивления в случае нормального металла.

§ 4. Неприменимость теории возмущения к задаче о сверхпроводнике

В гл. 10 мы видели, что закон дисперсии квазичастиц в случае нормальной ферми-системы можно получить из одночастичной функции Грина. Попробуем теперь найти тем же методом закон дисперсии для квазичастиц в сверхпроводнике (боголонов). Можно ожидать, что в этом случае функция Грина будет чем-то вроде

$$G(\mathbf{k}, \omega) \sim \frac{1}{\omega - \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2} + i\delta}; \quad (15.40)$$

действительно, это выражение имеет полюс, приводящий к закону дисперсии боголона (15.37).

Будем предполагать сначала, что разложение для функции Грина имеет обычный вид (9.40), где в качестве потенциала взаимодействия фигурирует выражение (15.13) (оно предполагается отрицательным, ибо мы имеем дело со сверхпроводником). Попытавшись теперь провести вычисления G

обычным способом, мы потерпим неудачу, так как обнаружим, что в разложении (9.40) [или (10.8) для массового оператора] возникают классы диаграмм, суммирование которых приводит к *нестабильному* результату. Это — диаграммы, в которых пары частиц с равными, но противоположными импульсами (так называемые куперовские пары) испытывают многократное рассеяние друг на друге. Примером такого класса служит заключенная в скобки последовательность в разложении собственно-энергетической части

$$\Sigma = \text{[diagram]} + \left\{ \text{[diagram]} + \text{[diagram]} + \text{[diagram]} + \text{[diagram]} + \dots \right\} + \text{[crossed diagram]} + \dots \quad (15.41)$$

Здесь волнистая линия \sim означает потенциал БКШ-взаимодействия \mathcal{V}_{kq}^0 . Эту последовательность лестничных диаграмм можно просуммировать с помощью уравнения (10.20) для K -матрицы и соотношения (10.22) с полным импульсом $\mathbf{q} = 0$ (см., например, [58]). Оказывается, что K -матрица в силу отрицательности \mathcal{V}_{kq}^0 имеет два чисто мнимых полюса $\pm i\alpha$. Вблизи этих полюсов K -матрица имеет вид

$$K(\mathbf{q} = 0, \omega) = \frac{c}{\omega + i\alpha} + \frac{c'}{\omega - i\alpha} + \dots \quad (15.42)$$

Переходя с помощью фурье-преобразования к t -пространству, находим

$$K(\mathbf{q} = 0, t) = ce^{-\alpha t} + c'e^{+\alpha t} + \dots \quad (15.43)$$

Второе слагаемое этого выражения при $t \rightarrow \infty$ неограниченно возрастает, что и доказывает нестабильность полученного решения. Отсюда, согласно соотношению (10.22), автоматически следует плохое поведение и массового оператора Σ , что и указывает на неприменимость обычной теории возмущений в случае сверхпроводника¹⁾.

В действительности нет никакой необходимости получать все это столь окольным путем — к тому же выводу можно прийти просто на основании замечания, приведенного в связи

¹⁾ Этот вывод правилен, строго говоря, только в случае бесконечно большого сверхпроводника (см. [45]).

с фиг. 15. В самом деле, в случае сверхпроводника поверхность Ферми отсутствует, поэтому, согласно результатам § 3 гл. 11, теория возмущений здесь неприменима. Другой способ убедиться в этом — разложить энергию основного состояния (15.33) в ряд

$$E_0 = E_0 \text{ (нормальной фазы)} - 2N(0) (\hbar\omega_c)^2 \times \\ \times \left[1 - \frac{2}{N(0)V} + \frac{1}{2!} \left(\frac{2}{N(0)V} \right)^2 + \dots \right]. \quad (15.44)$$

Разложение же, основывающееся на теории возмущений, имеет вид

$$E = a_0 + a_1 V + a_2 V^2 + \dots \quad (15.45)$$

Здесь каждое слагаемое стремится к нулю при $V \rightarrow 0$, в разложении же (15.44) каждое слагаемое при $V \rightarrow 0$ стремится к бесконечности [хотя их сумма, согласно (15.33), остается конечной!]. Иначе говоря, E_0 есть „неаналитическая“ функция V , и ее нельзя разложить в ряд теории возмущений.

Указанную трудность можно сформулировать в виде общего утверждения, что методы теории возмущений (использованные на протяжении всей книги) применимы только тогда, когда возмущенное состояние качественно подобно невозмущенному (или „имеет ту же симметрию“). Это означает, что, какой бы *фазовый переход* ни испытала система: газ \rightarrow жидкость, жидкость \rightarrow кристалл, парамагнетик \rightarrow ферромагнетик или нормальный металл \rightarrow сверхпроводник, — теория возмущений оказывается неприменимой, поскольку такой переход связан с качественным изменением системы. (Общее обсуждение теории фазовых переходов см. в работе [45].)

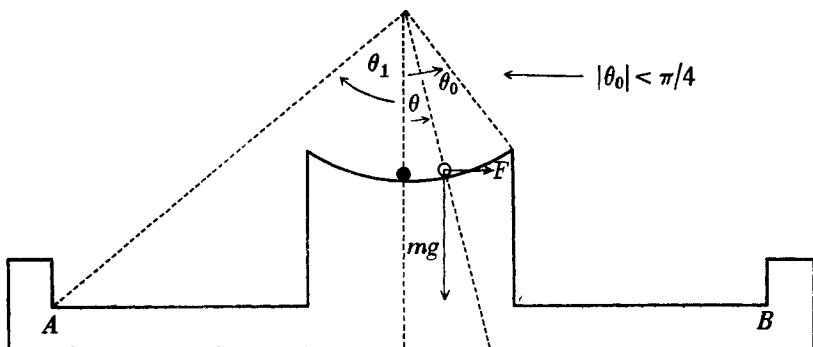
Эти соображения можно проиллюстрировать с помощью простого классического примера. Рассмотрим мраморный шарик в кольцевой канавке и будем полагать, что он не испытывает трения (фиг. 17). Угол, определяющий устойчивое положение шарика $\theta(F/mg)$ в зависимости от внешней силы F и его собственного веса mg , можно разложить в ряд теории возмущений по степеням F

$$\theta = \frac{F}{mg} - \frac{1}{3} \left(\frac{F}{mg} \right)^3 + \frac{1}{5} \left(\frac{F}{mg} \right)^5 - \dots \quad (15.46) \\ \left(= \arctg \frac{F}{mg} \right).$$

Это разложение дает математически верный результат в области $|F/mg| < 1$ или $-\pi/4 < \theta < +\pi/4$. Физически, однако, очевидно, что разложение это отказывает при $|\theta| > \theta_0$, когда

шарик испытает „фазовый переход“, упав с канавки и покотившись в угол A или B . Таким образом, используя даже весь бесконечный ряд, т. е. формулу $\arctg(F/mg)$, мы придем к неправильному результату.

Математическую причину того, что диаграммное разложение для G оказывается несправедливым, легко понять



Фиг. 17. Классическая система, иллюстрирующая неприменимость теории возмущений в случае фазового перехода.

с помощью результатов приложения V [см. (V.12)]. Там отмечается, что разложение несправедливо, если

$$\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle = 0. \quad (15.47)$$

Это просто означает, что основное состояние системы с взаимодействием ортогонально к основному состоянию системы без взаимодействия, т. е. они имеют различную симметрию.

§ 5. Краткий обзор формализма Намбу

Наводящее соображение о том, как построить теорию возмущений, чтобы она приводила к основному состоянию сверхпроводника, вытекает из того, что БКШ смогли получить это состояние только благодаря введению „загадочного“ предположения о парном характере волновой функции сверхпроводника [см. (15.14) и (15.15)]. Если бы удалось как-нибудь втиснуть это предположение в рамки теории возмущений, мы смогли бы получить функцию Грина (15.40) для боголона.

Чтобы сделать это, необходимо ввести *аномальные функции Грина* F и \bar{F} , отвечающие уничтожению или рождению

куперовской пары в сверхпроводящем основном состоянии (см. [58, 59]). Альтернативные методы предложены в работах [52, 30]¹⁾. Аномальные функции Грина определяются следующим образом:

$$F(\mathbf{k}, t) = -i \langle \Psi_0 | T \{ c_{k\uparrow}(t) c_{-k\downarrow}(0) \} | \Psi_0 \rangle, \quad (15.48)$$

$$F^+(\mathbf{k}, t) = -i \langle \Psi_0 | T \{ c_{-k\downarrow}^+(t) c_{k\uparrow}^+(0) \} | \Psi_0 \rangle. \quad (15.49)$$

Волновая функция $|\Psi_0\rangle$ отвечает здесь основному состоянию сверхпроводника и должна рассматриваться как функция типа (15.29): число частиц в основном состоянии строго не фиксировано, но распределение по числу частиц имеет резкий пик при среднем значении N (см. дискуссию после формулы (15.32) и книгу [58]). Физически F^+ есть амплитуда вероятности того, что если в момент времени $t=0$ к системе добавлен электрон из куперовской пары с импульсом \mathbf{k} и спином \uparrow , а в момент t добавлен электрон с импульсом $-\mathbf{k}$ и спином \downarrow , то в момент t система по-прежнему будет находиться в основном состоянии.

Существуют два эквивалентных способа включения этих новых функций Грина в диаграммный формализм. Первый связан с введением новых диаграмм для F и F^+ (см. [1]). Во втором, предложенном Намбу, используются прежние диаграммы с той разницей, что из функций F , F^+ и G строится *матричная функция Грина*²⁾. Мы очень бегло обсудим метод Намбу.

Матричная функция Грина \mathbb{G} определяется как

$$\begin{aligned} \mathbb{G}(\mathbf{k}, t) &= \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G(\mathbf{k}\uparrow, t) & F(\mathbf{k}, t) \\ F^+(\mathbf{k}, t) & -G(-\mathbf{k}\downarrow, -t) \end{pmatrix} = \\ &= -i \begin{pmatrix} \langle \Psi_0 | T \{ c_{k\uparrow}(t) c_{k\uparrow}^+(0) \} | \Psi_0 \rangle & \langle \Psi_0 | T \{ c_{k\uparrow}(t) c_{-k\downarrow}(0) \} | \Psi_0 \rangle \\ \langle \Psi_0 | T \{ c_{-k\downarrow}^+(t) c_{k\uparrow}^+(0) \} | \Psi_0 \rangle & \langle \Psi_0 | T \{ c_{-k\downarrow}^+(t) c_{-k\uparrow}(0) \} | \Psi_0 \rangle \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (15.50)$$

Свободная функция Грина получается заменой волновой функции системы Ψ_0 на волновую функцию в отсутствие

¹⁾ См также [82] В этой работе было получено асимптотически точное решение задачи с потенциалом (15.28). — *Прим ред.*

²⁾ Обобщение метода матричных функций Грина на случай любого фазового перехода в системе фермионов обсуждается в работе [45].

взаимодействия Φ_0 . Это дает в (\mathbf{k}, ω) -пространстве

$$\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta} \end{pmatrix}. \quad (15.51)$$

Легко получить разложение \mathbb{G} в ряд теории возмущений. Для этого надо прежде всего выразить все операторы через двухкомпонентные фермионные спинорные операторы

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{k}) \\ \Psi_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}). \quad (15.52)$$

Тогда матричная функция Грина приобретает компактную форму

$$G_{ij}(\mathbf{k}, t) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \Psi_i(\mathbf{k}, t) \Psi_j^{\dagger}(\mathbf{k}, 0) \} | \Psi_0 \rangle, \quad (15.53)$$

а гамильтониан БКШ (15.10) принимает вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \tau_3 \Psi_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', q} \mathcal{V}_{\mathbf{k}q} (\Psi_{\mathbf{k}+q}^{\dagger} \tau_3 \Psi_{\mathbf{k}}) (\Psi_{\mathbf{k}'-q}^{\dagger} \tau_3 \Psi_{\mathbf{k}'}). \quad (15.54)$$

Здесь τ_i суть матрицы Паули

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15.55)$$

[Обратите внимание: подставив операторы (15.52) в гамильтониан (15.54) и перемножив матрицы, мы приходим к гамильтониану (15.10) с некоторыми дополнительными слагаемыми. Эти слагаемые можно скомпенсировать специальным выбором \mathbb{G}_0 (см. [58]). Таким образом, будучи выражены через спинорные операторы, функция Грина \mathbb{G} и гамильтониан H имеют ту же форму, что и G и H для нормальной системы. Поэтому для \mathbb{G} можно составить тот же диаграммный ряд, что и для G :

$$\mathbb{G} = \begin{array}{c} \parallel \\ \parallel \end{array} = \begin{array}{c} | \\ | \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \dots \quad (15.56)$$

Разница состоит лишь в том, что теперь следует использовать новый словарь (табл. 14), в котором различным линиям соответствуют матрицы.

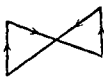
Диаграмма	Функция
	$i\mathbb{G}(\mathbf{k}, \omega)$
	$i\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, \omega) = i \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i\delta} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\omega + \varepsilon_k + i\delta} \end{pmatrix} =$ $= i \frac{\omega 1 + \varepsilon_k \tau_3}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 + i\delta}$



Каждая вершина: τ_3
Волнистая линия: $-i\mathcal{V}_{kq}$

Потенциал взаимодействия
БКШ

Фермионная петля
Пример:



$(-1) \times$ Шпур от произведения функций
Грина \mathbb{G}_0 и операторов τ_3 , образующих петлю

Например, для диаграммы низшего порядка мы имеем

$$= [i\mathbb{G}_0(\mathbf{k}, \omega)]^2 \times$$

$$\times \int \frac{d^3k' d\omega'}{(2\pi)^4} (-i) \mathcal{V}^{k', k'-k} \tau_3 i\mathbb{G}_0(\mathbf{k}', \omega') \tau_3.$$

(15.57)

Очевидно, здесь также применимы все трюки с частичным суммированием диаграмм.

Уравнение Дайсона имеет вид

$$\begin{array}{c} \parallel \\ \uparrow \end{array} = \frac{1}{\begin{array}{c} \uparrow -1 \\ - \\ \Sigma \end{array}} ; \quad \begin{array}{c} \Sigma \\ \uparrow \end{array} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots \quad (15.58)$$

а потенциал взаимодействия и функции Грина можно перенормировать, что приведет к соотношениям (10.60), (11.3) или (11.5) с той лишь разницей, что все диаграммы следует вычислять с помощью словаря Намбу (табл. 14).

Метод Намбу приводит к элементарным возбуждениям — бозонам — с законом дисперсии (15.37) в низшем порядке самосогласованной теории возмущений, в которой учитываются два первых члена разложения (11.3). Таким образом, следует совместно решить два матричных уравнения

$$\begin{array}{c} \parallel \\ \uparrow \end{array} = \frac{1}{\begin{array}{c} \uparrow -1 \\ - \\ \Sigma \end{array}} ; \quad \begin{array}{c} \Sigma \\ \uparrow \end{array} \approx \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (15.59)$$

Переводя это с помощью табл. 14 на язык функций, получим

$$\mathbb{G}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} \tau_3 - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (15.60)$$

где в отличие от выражения (15.57) массовый оператор Σ определяется одетой функцией Грина \mathbb{G} . Решая уравнение (15.60) с взаимодействием БКШ, находим

$$G_{11} \equiv G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{\omega - \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} + i\delta} + \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{\omega + \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} - i\delta}, \quad (15.61)$$

где величины $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ и $\Delta_{\mathbf{k}}$ совпадают с аналогичными величинами [см. (15.29), (15.30) и (15.32)] в решении БКШ. Таким образом, метод Намбу приводит к функции Грина, первое слагаемое которой имеет вид (15.40).

Физический смысл двух слагаемых в выражении (15.61) становится ясным, если произвести каноническое преобразование Боголюбова непосредственно в функции Грина. Используя соотношения (15.35), мы получаем

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, t) &= -i \langle \Psi_0 | T \{ c_{\mathbf{k}\uparrow}(t) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger(0) \} | \Psi_0 \rangle = \\ &= -iu_{\mathbf{k}}^2 \langle \Psi_0 | T \{ \alpha_{\mathbf{k}}(t) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger(0) \} | \Psi_0 \rangle - \\ &= -iv_{\mathbf{k}}^2 \langle \Psi_0 | T \{ \beta_{\mathbf{k}}^\dagger(t) \beta_{\mathbf{k}}(0) \} | \Psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (15.62)$$

(Слагаемое с произведением $\alpha_k \beta_k$ равно нулю.) Здесь операторы $\alpha_k(t)$, $\beta_k(t)$ и т. д., так же как и c_k в выражении (9.3), берутся в представлении Гейзенберга. Используя соотношения (15.38) и (15.39) и совершая преобразование Фурье, мы приходим как раз к выражению (15.61). Это показывает, что первое слагаемое в (15.61) описывает α -боголоны, а второе — β -боголоны [см. дискуссию после формулы (15.37)].

§ 6. Рассмотрение эффектов запаздывания в формализме Намбу

Как теория БКШ, так и только что проделанные нами вычисления, базирующиеся на методе Намбу, страдают одним дефектом — фрелиховское взаимодействие рассматривается в них как мгновенное. В действительности, поскольку фону для перехода от одного электрона к другому требуется определенное время, это взаимодействие оказывается запаздывающим (т. е. зависящим от времени). Единственный способ учесть это запаздывание — с самого начала рассматривать фононы в рамках теории поля. Это означает, что в качестве исходного надо брать не канонически преобразованный гамильтониан (15.10), а прежний гамильтониан (15.4), содержащий точную энергию электрон-фононного взаимодействия. Тогда, чтобы вычислить функцию Грина, необходимо ввести специальные диаграммы для свободных фононов и для электрон-фононного взаимодействия.

Для нормальной системы взаимодействующих электронов и фононов эта программа реализована в приложении X. Там показано, что вычисление электронной функции Грина в этом случае выполняется так же, как и для прямого электрон-электронного взаимодействия, с той лишь разницей, что кулоновское взаимодействие заменяется на *комбинированное*, представляющее собой сумму кулоновского и запаздывающего (фрелиховского) взаимодействий:

The diagrammatic equation (15.63) shows the decomposition of a combined interaction into two parts. On the left, a vertical arrow labeled 't' is connected to a vertex, which is then connected to another vertex by a wavy line representing a combined interaction. This is equal to the sum of two diagrams: the first is a wavy line representing a Coulomb interaction, and the second is a wavy line with a small circle at its end representing a Frélich interaction.

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ t \end{array} \text{---} \text{---} \text{---} = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \quad (15.63)$$

КОМБИНИРОВАННОЕ **КУЛОНОВСКОЕ** **ФРЕЛИХОВСКОЕ**
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ **ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ** **ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ**

Диаграмма фрелиховского взаимодействия отвечает испусканию виртуального фонона (seeeee) одним электроном и поглощению его другим электроном. Эти диаграммы приве-

дены в (k, t) -пространстве, чтобы продемонстрировать их запаздывающий характер.

Как показано в приложении X, БКШ-взаимодействие представляет собой просто статическую аппроксимацию комбинированного взаимодействия. Следовательно, можно грубо утверждать, что если в комбинированном взаимодействии преобладает отталкивание, то система будет нормальной, если же преобладает притяжение, то система будет сверхпроводящей.

Учет запаздывания при вычислении электронных функций Грина сверхпроводника в методе Намбу (табл. 14) сводится просто к замене БКШ-взаимодействия комбинированным (15.63). Все вычисления проводятся так же, как и в § 5 настоящей главы.

Такие вычисления с учетом запаздывания [58] привели к щели, зависящей от энергии, что хорошо согласуется с результатами по туннельному эффекту для свинца.

Литература для дальнейшего чтения:

ТИНКХЕМ [66],
ШРИФФЕР [58, 59],
БЕЛЯЕВ [4],
ПАЙНС [52],
АБРИКОСОВ, ГОРЬКОВ, ДЯЗЛОШИНСКИЙ [1],
ТАУЛЕС [64]

Электрон-фононное взаимодействие

ПРИЛОЖЕНИЕ X,
ПАЙНС [53],
ШУЛЬЦ [60],
ПАЙНС [52],
ШРИФФЕР [58, 59],
БОГОЛОВОВ [89].

Упражнения

1. Показать, что операторы $2 \sum_k \epsilon_k b_k^\dagger b_k$ и $\sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ в пространстве парных волновых функций (15.14) действуют одинаково

2. Показать с помощью (7.32), что боголюбовские операторы (15.34) обладают фермионными соотношениями коммутации (например, доказать, что $[\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}$).

3. Какова энергия сверхпроводника в состоянии $\alpha_{k_2}^\dagger \beta_{k_2}^\dagger \alpha_{k_1}^\dagger | \Psi_0 \rangle$?

4. Проверить, что функция Грина (15.53) эквивалентна (15.50).

5. Проверить, что первое слагаемое в гамильтониане (15.54) с точностью до бесконечной постоянной эквивалентно квазиэлектронному гамильтониану (15.11).

6. Используя формализм Намбу, выпишите выражение для диаграммы типа „пузырь“, входящей в (15.56)

7. Прделайте подробно боголюбовское преобразование в функции Грина (15.62).

ФОНОНЫ С МНОГОЧАСТИЧНОЙ

ТОЧКИ ЗРЕНИЯ

В § 2 гл. 1 мы нашли энергию основного состояния и закон дисперсии фононов, применяя к гамильтониану решетки (1.28) каноническое преобразование (1.29), (1.30) и (1.36). В данной главе будет показано, как можно получить те же результаты с помощью диаграммной техники. Это чрезвычайно простой пример использования диаграммного метода для описания системы бозонов.

Прежде всего гамильтониан (1.28) переписывается в виде суммы невозмущенного гамильтониана, описывающего очень простой вид коллективного возбуждения, называемого *эйнштейновским фононом*, и гамильтониана возмущения, описывающего сильное взаимодействие между эйнштейновскими фононами. Учет этого взаимодействия приводит к тому, что эйнштейновский фонон оказывается окруженным облаком других эйнштейновских фононов. Это облако „одевает“ его, превращая в обычный фонон. Таким образом, мы имеем

$$\begin{array}{l} \text{Голый эйнштейновский} \\ \text{фонон} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Облако других} \\ \text{эйнштейновских} \\ \text{фононов} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Эйнштейновский} \\ \text{квазифонон} \end{array} = \\ = \text{Обычный фонон.} \end{array}$$

Следовательно, обычный фонон можно интерпретировать как квазичастицу — особый вид „коллективного возбуждения“. Это аналогично интерпретации соотношения (13.24), где мы получили одетый плазмон, или квазиплазмон:

$$\begin{array}{l} \text{Голый плазмон} + \\ \text{и других плазмонов} \end{array} \begin{array}{l} \text{Облако электронов} \\ \text{и других плазмонов} \end{array} = \text{Квазиплазмон,}$$

или, как показано в приложении X, одетый фонон, или квазифонон, можно определить символически равенством

$$\text{Голый фонон} + \text{Электронное облако} = \text{Квазифонон}^1).$$

¹⁾ Дальнейший текст этой главы представляет собой статью автора, опубликованную им в журнале *Annals of Physics*, 27, № 2 (1964). — *Прим. ред.*

Фонон рассматривается как квазичастица, представляющая собой эйнштейновский фонон, одетый в результате взаимодействия с другими эйнштейновскими фононами. Функция Грина эйнштейновского фонона вычисляется путем точного суммирования бесконечного ряда диаграмм для собственно-энергетической части, и ее полюсы определяют хорошо известный закон дисперсии фононов. Альтернативный вывод показывает, что эта функция Грина имеет смысл и вне области сходимости ряда. Легко вычисляется и энергия основного состояния путем суммирования диаграмм вакуумных флуктуаций, причем каждая из диаграмм имеет кольцевой вид. Необычная простота встречающихся здесь диаграмм делает приведенные вычисления идеальной иллюстрацией применения техники теории поля к задаче многих тел.

§ 1. Введение

Обычно при теоретико-полевым рассмотрении [47] фонон считается голой частицей, которая из-за столкновений с другими фононами или электронами превращается в одетую частицу, т. е. в квазичастицу. Это приводит к затуманиванию того факта, что фонон сам по себе есть квазичастица особенно простого вида — эйнштейновский фонон, одетый в результате взаимодействия с другими эйнштейновскими фононами. Наша цель заключается в детальном развитии этой точки зрения путем демонстрации того, как с помощью точного суммирования собственно-энергетических диаграмм для эйнштейновского фонона и кольцевых диаграмм можно получить закон дисперсии фононов и энергию основного состояния. Это рассмотрение представляет собой, по-видимому, простейший из существующих примеров приложения техники квантовой теории поля к задаче многих тел и служит идеальной с педагогической точки зрения иллюстрацией тех достоинств, которые делают диаграммный метод популярным: возможность работать с бесконечным рядом теории возмущений (т. е. способность справиться со случаем сильной связи, находящимся вне пределов досягаемости обычной процедуры теории возмущений), его в высшей степени систематический и, так сказать, „автоматический“ характер, живая иллюстративная привлекательность и замечательная способность приводить к результатам, справедливым вне области сходимости.

Гамильтониан модельной системы записывается в виде суммы невозмущенного гамильтониана, отвечающего совокупности независимых колебаний решетки с одинаковой частотой (эйнштейновские фононы), и гамильтониана возмущения, описывающего сильную связь между фононами. После стандартного канонического преобразования функцию Грина

эйнштейновского фона можно представить в двух различных формах:

$$G(k, t) = -i \langle \psi_0 | T \{ b_k(t) b_k^\dagger(0) \} | \psi_0 \rangle,$$

и

$$D(k, t) = -i \langle \psi_0 | T \{ [b_{-k}(t) + b_k^\dagger(t)] [b_k(0) + b_{-k}^\dagger(0)] \} | \psi_0 \rangle,$$

где b_k^\dagger и b_k — операторы рождения и уничтожения эйнштейновского фона. Эти функции Грина вычисляются путем точного суммирования диаграмм всех порядков для собственно-энергетической части. Полюсы полученной таким образом одетой функции Грина определяют перенормированные частоты эйнштейновских фонов, т. е. хорошо известный закон дисперсии фонов. Будет показано, что с математической точки зрения легче иметь дело с D -формой функции Грина (так как здесь отпадает необходимость суммирования диаграмм с линиями, направленными в обратную сторону), однако при физической интерпретации возникает больше трудностей. Несмотря на то, что получающееся выражение для функции Грина кажется неприменимым в некоторых областях из-за расходимостей, альтернативный вывод показывает, что фактически оно должно быть справедливо везде. В следующем параграфе вычисляется энергия основного состояния путем точного суммирования бесконечного ряда кольцевых диаграмм (оказывается, что это просто разложение корня $\sqrt{1-x}$).

Следует подчеркнуть, что, хотя излагаемая здесь точка зрения и нова, конечный результат *не нов*, и процедура, используемая для его получения, *не проще* обычно применяемой техники канонического преобразования. Мы следуем теоретико-полевому маршруту, во-первых, для того, чтобы показать, сколь хорошо фоны укладываются в квазичастичные представления о веществе, возникшие в последние десять лет [62], и, во-вторых, для демонстрации крайне простой модельной системы, где техника теории многих тел оказывается прозрачной, а результат точным.

§ 2. Гамильтониан связанных эйнштейновских фонов

Рассмотрим линейную цепочку из N атомов, расположенных на расстоянии d друг от друга, и пусть константа гармонического взаимодействия равна $\frac{1}{2} m \omega_0^2$. Гамильтониан

цепочки можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{l=1}^N \frac{p_l^2}{2m} + \frac{1}{4} m \omega_0^2 \sum_{l=1}^N (u_{l+1} - u_l)^2 = \\
 &= \sum_{l=1}^N \left[\frac{p_l^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 u_l^2 \right] - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \sum_{l=1}^N u_l u_{l+1}, \quad (16.1)
 \end{aligned}$$

где p_l и u_l — операторы импульса и смещения атома в точке l . При этом мы пренебрегаем влиянием концов цепочки. Выражение (16.1) можно переписать в представлении вторичного квантования, если ввести операторы рождения и уничтожения кванта возбуждения l -го осциллятора, т. е. b_l^\dagger и b_l :

$$\begin{aligned}
 u_l &= \sqrt{\frac{1}{2m\omega_0}} (b_l + b_l^\dagger), \\
 p_l &= \frac{1}{i} \sqrt{\frac{m\omega_0}{2}} (b_l - b_l^\dagger)
 \end{aligned} \quad (16.2)$$

(мы положили здесь $\hbar = 1$). Результат имеет вид

$$H = \omega_0 \sum_l \left(b_l^\dagger b_l + \frac{1}{2} \right) - \frac{\omega_0}{4} \sum_l (b_l + b_l^\dagger)(b_{l+1} + b_{l+1}^\dagger). \quad (16.3)$$

Далее, производя фурье-преобразование

$$\begin{aligned}
 b_l &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k b_k e^{ikld}, \\
 b_l^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k b_k^\dagger e^{-ikld},
 \end{aligned} \quad (16.4)$$

находим

$$H = \omega_0 \sum_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right) - \frac{\omega_0}{4} \sum_k e^{-ikd} (b_k + b_{-k}^\dagger)(b_{-k} + b_k^\dagger). \quad (16.5)$$

Используя тот факт, что операторы b_k удовлетворяют бозевским соотношениям коммутации

$$[b_k, b_{k'}^\dagger]_- = \delta_{kk'}, \quad [b_k, b_{k'}]_- = [b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger]_- = 0, \quad (16.6)$$

последнее слагаемое в (16.5) можно преобразовать таким образом, чтобы суммирование в нем проводилось лишь по

области $k > 0$. В результате приходим к требуемой исходной форме гамильтониана ¹⁾

$$H = \omega_0 \sum_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right) - \frac{\omega_0}{2} \sum_{k > 0} \cos kd (b_k + b_{-k}^\dagger)(b_{-k} + b_k^\dagger) = H_0 + H_1. \quad (16.7)$$

Невозмущенный гамильтониан H_0 есть гамильтониан всех осцилляторов решетки с операторами числа частиц $b_k^\dagger b_k$ и общей частотой ω_0 , т. е. гамильтониан голых эйнштейновских фононов. Взаимодействуя друг с другом благодаря возмущению H_1 , они превращаются в одетые, а их частота становится зависящей от k , т. е. эти фононы переходят в обычные. Задача состоит в отыскании нового закона дисперсии ω_k и энергии основного состояния E_0 .

Так как оператор H_1 того же порядка, что и H_0 , теория возмущений здесь неприменима, во всяком случае, в своей обычной форме. Стандартное решение, приводимое в учебнике [68], сводится к каноническому преобразованию этого гамильтониана. Определяя новые операторы

$$\begin{aligned} \phi_k &= b_k + b_{-k}^\dagger, \\ \pi_k &= i(b_k - b_{-k}^\dagger), \end{aligned} \quad (16.8)$$

можно переписать гамильтониан H в виде

$$H = \frac{\omega_0}{2} \sum_{k > 0} \{ \pi_k^\dagger \pi_k + (1 - \cos kd) \phi_k^\dagger \phi_k - 2 \}. \quad (16.9)$$

Вводя бозевские операторы a_k^\dagger и a_k с помощью соотношений

$$\begin{aligned} \phi_k &= \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega_k}} (a_k + a_{-k}^\dagger), \\ \pi_k &= i \sqrt{\frac{\omega_k}{\omega_0}} (a_k^\dagger - a_{-k}), \quad \omega_k = \omega_0 \sqrt{1 - \cos kd}, \end{aligned} \quad (16.10)$$

получаем

$$H = \sum_k \omega_k \left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right). \quad (16.11)$$

Ясно, что этот гамильтониан отвечает совокупности квази-частиц с операторами числа частиц $a_k^\dagger a_k$, с законом дисперсии

$$\omega_k = \omega_0 \sqrt{1 - \cos kd} \quad (16.12a)$$

¹⁾ См. примечание на стр. 158.

и с энергией основного состояния

$$E = \sum_k \frac{\omega_k}{2}. \quad (16.126)$$

Все эти соотношения хорошо известны для фононов.

Покажем теперь, как эти точные результаты можно получить с помощью диаграммного метода теории многих частиц. Закон дисперсии будет найден в § 3 и 4, а энергия основного состояния — в § 6 настоящей главы.

§ 3. Определение функции Грина эйнштейновского фонона

Теоретико-полевой метод определения элементарных возбуждений системы многих тел сводится к нахождению функции Грина, полюсы которой непосредственно дают энергии возбужденных состояний [22]¹⁾. Функцию Грина для эйнштейновского фонона можно определить двумя способами. Простейшее определение с точки зрения физической интерпретации есть

$$G(k, t) = -i \langle \psi_0 | T \{ b_k(t) b_k^\dagger(0) \} | \psi_0 \rangle, \quad (16.13)$$

где $b_k(t)$ — оператор b_k в гейзенберговском представлении

$$b_k(t) = e^{+iHt} b_k e^{-iHt}. \quad (16.14)$$

Оператор T — виковский оператор упорядочения во времени для бозонов; он имеет следующие свойства.

$$\begin{aligned} T \{ A(t') B(t) \} &= A(t') B(t), \quad t' > t, \\ &= B(t) A(t'), \quad t' < t. \end{aligned} \quad (16.15)$$

Волновая функция $|\psi_0\rangle$ есть точная волновая функция основного состояния системы взаимодействующих эйнштейновских фононов, или „вакуум с взаимодействием“. Физический смысл введенной выше функции Грина состоит в следующем. Она определяет амплитуду вероятности того, что если в момент времени $t=0$ в вакуум с взаимодействием был внесен эйнштейновский фонон в состоянии k , то после его „распространения“ по системе в момент времени t ($t > 0$) мы будем наблюдать эйнштейновский фонон в состоянии k . В отсутствие

¹⁾ См также [83] — *Прим ред.*

взаимодействия $G(k, t)$ превращается в свободную функцию Грина

$$G_0(k, t) = -i \{ \theta_t \langle 0 | b_k(t) b_k^\dagger(0) | 0 \rangle + \theta_{-t} \langle 0 | b_k^\dagger(0) b_k(t) | 0 \rangle \} = -i \theta_t e^{-i\omega_0 t}, \quad (16.16)$$

где $|0\rangle$ есть волновая функция вакуума без взаимодействия (т. е. состояния без эйнштейновских фононов). Нам понадобится также вспомогательная функция Грина, описывающая „обратное“ во времени распространение в отсутствие взаимодействия:

$$G_0^- = -i \langle 0 | T \{ b_k^\dagger(t) b_k(0) \} | 0 \rangle_{H_1=0} = -i \theta_{-t} e^{+i\omega_0 t}. \quad (16.17)$$

Более удобно работать с фурье-трансформантами этих функций

$$G_0(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G_0(k, t) = + \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\delta}, \quad (16.18)$$

$$G_0^-(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G_0^-(k, t) = - \frac{1}{\omega + \omega_0 - i\delta}, \quad (16.19)$$

где δ есть положительное бесконечно малое число, необходимое для устранения слагаемых, осциллирующих при $t \rightarrow \infty$.

Другая функция Грина, с большим трудом поддающаяся физической интерпретации, но более удобная с математической точки зрения, определяется выражением

$$D(k, t) = -i \langle \psi_0 | T \{ \phi_k(t) \phi_k^\dagger(0) \} | \psi_0 \rangle, \quad (16.20)$$

где операторы

$$\phi_k = b_k + b_{-k}^\dagger, \quad \phi_k^\dagger = b_k^\dagger + b_{-k} = \phi_{-k} \quad (16.21)$$

пропорциональны фурье-трансформанте оператора смещения

$$u_k = \sum_l u_l e^{-ikld} = \sqrt{\frac{1}{2m\omega_0}} (b_k + b_{-k}^\dagger); \quad (16.22)$$

здесь использовано соотношение (16.2). Функцию $D(k, t)$ трудно интерпретировать с точки зрения эйнштейновских фононов. Можно считать, однако, что она отвечает распространению „волны смещения“ в вакууме с взаимодействием. Свободная функция Грина равна

$$D_0(k, t) = -i [\theta_t e^{-i\omega_0 t} + \theta_{-t} e^{+i\omega_0 t}], \quad (16.23)$$

а ее фурье-трансформанта есть

$$D_0(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_0 - i\delta} = \frac{2\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2 + 2i\delta\omega_0}. \quad (16.24)$$

Видно, что D_0 описывает распространение как вперед, так и назад во времени; именно поэтому ее использование несколько упрощает расчеты.

§ 4. Вычисление функции Грина путем точного суммирования диаграмм

Функции Грина можно вычислять как путем решения дифференциальных уравнений, которым они удовлетворяют (см. [31], гл. 3 и 4), так и путем разложения их в ряд теории возмущений, выраженный с помощью диаграмм, с последующим суммированием отдельных бесконечных совокупностей диаграмм [10, 64]. Последний способ имеет преимущество: у него систематический характер и высокая степень автоматизма. Именно его мы сейчас и рассмотрим. Будет видно, что в изучаемом случае можно провести суммирование всех диаграмм и получить точный результат.

Наиболее поучителен с физической точки зрения вывод закона дисперсии с помощью функции Грина $G(k, t)$. Ее можно представить в виде разложения Дайсона

$$G(k, t) = \lim_{\substack{\text{Im } T_1 \rightarrow \infty \\ -T_2}} \frac{\left\{ (-i) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n / n! \times \int_{T_1}^{T_2} dt_1 \dots \int_{T_1}^{T_2} dt_n \times \right.}{\left. \times \langle 0 | T \{ H_1(t_1) \dots H_1(t_n) b_k(t) b_k^\dagger(0) \} | 0 \rangle \right\}}{\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n / n! \times \int_{T_1}^{T_2} dt_1 \dots \int_{T_1}^{T_2} dt_n \times \right.}{\left. \times \langle 0 | T \{ H_1(t_1) \dots H_1(t_n) \} | 0 \rangle \right\}}, \quad (16.25)$$

где $b_k(t)$ есть оператор в представлении взаимодействия

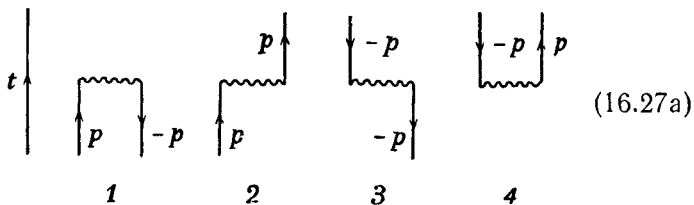
$$b_k(t) = e^{iH_0 t} b_k e^{-iH_0 t} \quad (16.26)$$

и

$$H_1(t) = e^{iH_0 t} H_1 e^{-iH_0 t} = \sum_{p>0} V_p [b_p(t) + b_{-p}^\dagger(t)] [b_{-p}(t) + b_p^\dagger(t)], \quad (16.27)$$

$$V_p = -\frac{\omega_0}{2} \cos pd. \quad (16.28)$$

Условимся сопоставлять оператору $b^\dagger(b)$ линию выше (ниже) линии взаимодействия, направленную вверх (вниз), если частица находится в состоянии с импульсом $+p$ ($-p$); тогда четыре слагаемых в $H_1(t)$ можно представить графически



Мы видим, что имеются четыре типа взаимодействия между эйнштейновскими фононами: 1) два эйнштейновских фонона (один в состоянии с импульсом p , а другой в состоянии с импульсом $-p$) сталкиваются в момент времени t и взаимно уничтожаются; 2) в момент t происходит аннигиляция одного эйнштейновского фонона в состоянии с импульсом p с одновременным рождением нового эйнштейновского фонона в состоянии с импульсом p и т. д. Согласно обычному рецепту теории поля, матричным элементам сопоставляются диаграммы. Тогда разложение (16.25) можно представить в виде суммы всех возможных последовательностей диаграмм, соответствующих таким взаимодействиям с входящим и выходящим голым эйнштейновским фононом:

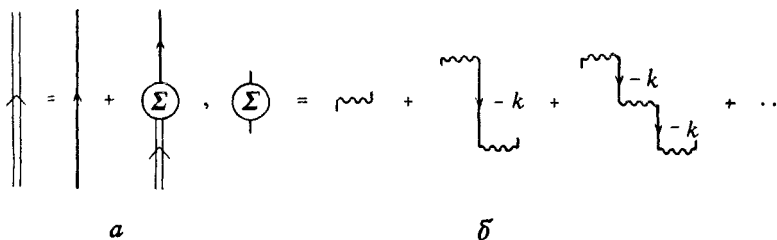
(16.25a)

Эти собственно-энергетические диаграммы показывают, что эйнштейновский фонон одевается облаком других эйнштейновских фононов с тем же или противоположным импульсом. (Отметим, что в отличие от электронной функции Грина поворот волнистой линии взаимодействия на 180° не приводит к новой диаграмме.) После перехода к (\mathbf{k}, ω) -пространству

путем преобразования Фурье эти диаграммы можно вычислить согласно следующим правилам:

- 1 Линии $(+k)$, направленной вперед во времени, сопоставляется множитель $iG_0(k, \omega)$.
- 2 Противоположно направленной линии $(-k)$ сопоставляется множитель $iG_0^-(k, \omega)$.
3. Волнистой линии взаимодействия сопоставляется множитель $-iV_k$.

Наиболее поучительно произвести суммирование с помощью уравнения Дайсона. Определим неприводимую собственно-энергетическую диаграмму для эйнштейновского фона как диаграмму, которую *нельзя* представить в виде двух частей, соединенных положительной k -линией. Таким образом, диаграммы 2 и 4 из (16.25а) неприводимые, в то время как диаграммы 3 и 5 приводимые. Тогда, суммируя все приводимые собственно-энергетические части, можно показать, что функция $G(k, t)$ удовлетворяет уравнению Дайсона (диаграмма а)



Как видно, Σ (диаграмма б) есть сумма всех неприводимых собственно-энергетических частей. Опуская для удобства бесконечно малую добавку и пользуясь правилами (16.29) и выражением (16.19), легко вычислить Σ :

$$\begin{aligned} -i\Sigma &= -iV_k \left[1 + (-iV_k) iG_0^- + (-iV_k)^2 (iG_0^-)^2 + \dots \right] = \\ &= \frac{-iV_k}{1 - V_k G_0^-} = \frac{-iV_k (\omega + \omega_0)}{V_k + \omega + \omega_0}. \end{aligned} \quad (16.30)$$

Из уравнения Дайсона

$$iG(k, \omega) = iG_0 + (iG_0)(-i\Sigma)(iG) \quad (16.31)$$

с помощью соотношений (16.18), (16.28) и (16.30) немедленно получаем

$$G(k, \omega) = \frac{\omega + \omega_0 \left(1 - \frac{1}{2} \cos kd \right)}{\omega^2 - \omega_0^2 (1 - \cos kd)}. \quad (16.32)$$

Перенормированные частоты эйнштейновских фононов даются полюсами функции Грина $G(k, \omega)$. Эти полюсы суть

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 - \cos kd}, \quad (16.33)$$

что в точности совпадает с законом дисперсии фононов (16.12).

Вывод закона дисперсии с помощью функции Грина $D(k, t)$ математически более прост, но лишен прелести непосредственной физической интерпретации. Функцию $D(k, t)$ можно разложить в ряд (16.25), подставив вместо $b_k(t)$ и $b_k^\dagger(0)$ операторы $\phi_k(t)$ и $\phi_k^\dagger(0)$, при этом гамильтониан возмущения H_1 будет иметь вид

$$H_1(t) = \sum_{p>0} V_p \phi_p(t) \phi_p^\dagger(t). \quad (16.34)$$

Диаграммное разложение в этом случае представляется в виде

Правила вычисления следующие:

1. Каждой линии сопоставляется множитель $iD_0(k, \omega)$.
2. Каждой волнистой линии сопоставляется множитель $-iV_k$.

В (k, ω) -пространстве это дает

$$iD(k, \omega) = iD_0 [1 + iD_0(-iV_k) + (iD_0)^2(-iV_k)^2 + \dots] = \frac{iD_0}{1 - D_0 V_k}, \quad (16.36)$$

откуда

$$D(k, \omega) = \frac{2\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2(1 - \cos kd)}, \quad (16.37)$$

что опять-таки приводит к правильному закону дисперсии фононов.

§ 5. Проблема сходимости

Во всех предыдущих рассуждениях мы игнорировали то обстоятельство, что суммируемый ряд сходится, только если величина, степени которой суммируются, по модулю меньше

единицы. Это условие ограничивает область частот, в которой справедливы полученные нами функции Грина. Так, выражение для $G(k, \omega)$ применимо, если частота ω удовлетворяет условиям

$$|V_k G_0^-| < 1, \quad (16.38a)$$

$$|G_0 \Sigma| < 1. \quad (16.38б)$$

Неравенство (16.38a) есть следствие выражения (16.30), а неравенство (16.38б) возникает в результате суммирования, приводящего к уравнению Дайсона (16.31). Далее формула для $D(k, \omega)$ применима, лишь если

$$|V_k D_0| < 1, \text{ т. е. } |\omega_0^2 \cos kd| < |\omega^2 - \omega_0^2|. \quad (16.39)$$

Это типичные трудности со сходимостью, преследующие теорию многих тел. Домашним лекарством против этого служит обычно предположение, что функции Грина можно аналитически продолжить на все значения ω . Часто это утверждение удается обосновать, получив тот же результат без использования теории возмущений. Общего доказательства до сих пор не существует [33].

В рассматриваемом случае с помощью непосредственного канонического преобразования самой функции Грина можно показать, что результаты справедливы и *вне* области сходимости. Рассмотрим для простоты функцию $D(k, \omega)$. Пусть \mathcal{O} есть оператор преобразования от представления обычных фононов к представлению эйнштейновских фононов. Тогда если $|\gamma\rangle$ есть волновая функция основного состояния в представлении обычных фононов, то

$$\mathcal{O}|\gamma\rangle = |\psi_0\rangle. \quad (16.40)$$

Подставляя это соотношение в (16.20) и используя определение (16.10), получаем

$$\begin{aligned} D(k, t) &= -i \langle \gamma | \mathcal{O}^{-1} T \{ \phi_k(t) \phi_k^\dagger(0) \} \mathcal{O} | \gamma \rangle = \\ &= -i \langle \gamma | T \{ \mathcal{O}^{-1} \phi_k(t) \mathcal{O} \mathcal{O}^{-1} \phi_k^\dagger(0) \mathcal{O} \} | \gamma \rangle = \\ &= -i \langle \gamma | T \left\{ \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega_k}} [a_k(t) + a_{-k}^\dagger(t)] \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega_k}} [a_k^\dagger(0) + a_{-k}(0)] \right\} | \gamma \rangle = \\ &= -i \frac{\omega_0}{\omega_k} \{ \theta_t e^{-i\omega_k t} + \theta_{-t} e^{+i\omega_k t} \}, \end{aligned} \quad (16.41)$$

откуда

$$D(k, \omega) = \frac{2\omega_0}{\omega^2 - \omega_k^2 + 2i\delta\omega_k}.$$

Это выражение в точности совпадает с (16.37), однако здесь не налагается *никаких* ограничений на ω . Таким образом, мы показали, что в рассмотренном прозрачном примере (а, возможно, и в более темных случаях) метод квантовой теории поля можно считать оправданным.

§ 6. Энергия основного состояния

Энергию основного состояния системы многих частиц с взаимодействием можно найти, воспользовавшись следующей теоремой ([10, 64] ¹⁾):

$$E = E_0 + i \lim_{\text{Im } t \rightarrow -\infty} \frac{d}{dt} \ln \langle \psi_0 | \tilde{U}(t) | \psi_0 \rangle. \quad (16.42)$$

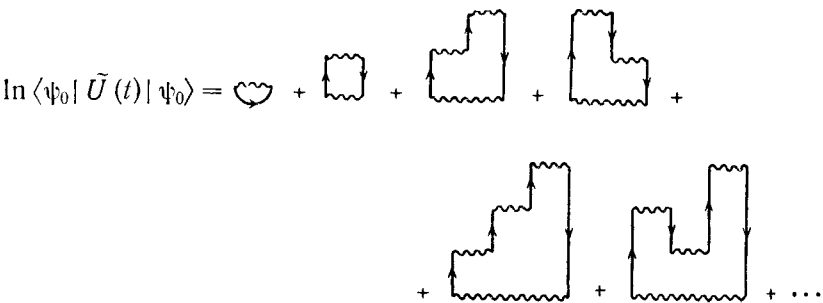
Здесь E_0 есть энергия основного состояния в отсутствие взаимодействия, а $\tilde{U}(t)$ — оператор рассеяния

$$\tilde{U}(t) = e^{+iH_0 t} e^{-iHt}. \quad (16.43)$$

Величина $\langle \psi_0 | \tilde{U}(t) | \psi_0 \rangle$ есть диагональный матричный элемент матрицы рассеяния, вычисленный для вакуума с взаимодействием. Его можно представить [10,64] в виде разложения

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \tilde{U}(t) | \psi_0 \rangle = \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^t dt_n \langle 0 | T \{ H_1(t_1) \dots H_1(t_n) \} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (16.44)$$

Это разложение можно изобразить графически как сумму по всем топологически различным „вакуумным диаграммам“. Логарифм от него есть просто сумма по всем связанным диаграммам



¹⁾ См также гл. 5 и 14.—Прим. ред.

Эти кольцевые диаграммы подобны тем, которые фигурируют в приближении случайных фаз (но много проще последних). Их можно вычислить либо с помощью правил (16.29), либо (16.35) (оба способа приводят к одному и тому же результату). Вычисляя каждую диаграмму, выполняя дифференцирование и предельный переход, требуемый соотношением (16.42), находим, что вклад каждой диаграммы в энергию определяется согласно следующим правилам:

- 1 Каждой волнистой линии сопоставляем множитель V_k
- 2 В каждом из $n-1$ интервалов между последовательными взаимодействиями диаграммы n -го порядка рисуем горизонтальную линию. Затем каждому пересечению горизонтальной линии с парой вертикальных линий диаграммы сопоставляем множитель $-\omega_0^{-1}$
- 3 Суммируем по всем k

(16.45)

Выполняя вычисления согласно этим правилам, получаем

$$\sum_{\text{диаграмм}} \text{по связанным} = \sum_{k>0} \left\{ V_k - V_k^2 \left[\frac{1}{2\omega_0} \right] + V_k^3 \left[\frac{1}{(2\omega_0)^2} + \frac{1}{(2\omega_0)^2} \right] - \right. \\ \left. - V_k^4 \left[2 \times \frac{1}{(2\omega_0)^3} + 2 \times \frac{1}{(2\omega_0)^2} \frac{1}{4\omega_0} + 2 \times \frac{1}{(2\omega_0)^3} \right] + \dots \right\}. \quad (16.46)$$

Согласно выражению (16.5), имеем

$$E_0 = \sum_k \frac{\omega_0}{2} = \sum_{k>0} \omega_0. \quad (16.47)$$

Комбинируя результаты (16.28), (16.46) и (16.47), находим окончательно

$$E = E_0 + \sum_{\text{по связанным диаграмм}} = \\ = \sum_{k>0} \omega_0 \left\{ 1 - \frac{1}{2} \cos kd - \frac{1}{8} \cos^2 kd - \frac{1}{16} \cos^3 kd - \frac{1}{16} \frac{5}{8} \cos^4 kd + \dots \right\} = \\ = \sum_{k>0} \omega_0 \sqrt{1 - \cos kd} = \sum_k \frac{\omega_k}{2}, \quad (16.48)$$

что совпадает с выражением (16.12).

Интересно отметить, что в отличие от случая суммирования для функций Грина здесь не возникает никаких трудностей с сходимостью, так как $\cos kd$ всегда меньше единицы. Это отличается и от суммирования при вычислении энергии основного состояния в приближении случайных фаз, где приходится предполагать, что результат суммирования логарифмического ряда можно продолжить в область расходимости [24].

ПРИЛОЖЕНИЯ

ПРИЛОЖЕНИЕ I
ФОРМАЛИЗМ ДИРАКА

ПРИЛОЖЕНИЕ II
ОПЕРАТОР ВРЕМЕННОЙ ЭВОЛЮЦИИ $U(t)$

ПРИЛОЖЕНИЕ III
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ
С ПОМОЩЬЮ ВАКУУМНОЙ АМПЛИТУДЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ IV
ОПЕРАТОР $\tilde{U}(t)$ И ЕГО РАЗЛОЖЕНИЕ

ПРИЛОЖЕНИЕ V
РАЗЛОЖЕНИЯ
ДЛЯ ОДНОЧАСТИЧНОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА
И ВАКУУМНОЙ АМПЛИТУДЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ VI
ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
С ПОМОЩЬЮ ТЕОРЕМЫ ВИКА

ПРИЛОЖЕНИЕ VII
ВЫВОД ДИАГРАММНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ
ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА И ВАКУУМНОЙ АМПЛИТУДЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ VIII
СПЕКТРАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ

ПРИЛОЖЕНИЕ IX
КАК ИСПОЛЬЗОВАТЬ ДОБАВКУ $i\delta$

ПРИЛОЖЕНИЕ X
ФУНКЦИЯ ГРИНА ЭЛЕКТРОНА В НОРМАЛЬНОЙ
ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЕ

ФОРМАЛИЗМ ДИРАКА

Существуют три наиболее популярные формулировки квантовой теории — волновая механика Шредингера, матричная механика Гейзенберга и метод абстрактного векторного пространства Дирака. Все они эквивалентны, однако формулировка Дирака имеет определенные преимущества, будучи более компактной и общей, чем две других. Мы покажем, что уравнения метода Дирака находятся в той же связи с уравнениями методов Шредингера и Гейзенберга, как векторное равенство типа $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$ с соотношениями $A_x + B_x = C_x$, $A_y + B_y = C_y$ и $A_z + B_z = C_z$ (т. е. это другая форма записи векторного равенства через компоненты в некоторой ортогональной системе единичных базисных векторов). Мы будем иметь дело с одночастичной системой; обобщение на случай системы многих частиц очевидно.

В методе Шредингера состояние системы в момент времени t описывается *волновой функцией* и комплексно сопряженной с ней функцией

$$\psi(\mathbf{r}, t), \quad \psi^*(\mathbf{r}, t), \quad (\text{I. 1})$$

а динамическим переменным отвечают *дифференциальные операторы*

$$\mathbf{r}, \quad \nabla_r, \quad \alpha = \alpha(\mathbf{r}, -i\nabla_r),$$

например оператор энергии

$$H = -\frac{1}{2m} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \quad (\hbar = 1). \quad (\text{I. 2})$$

Волновая функция удовлетворяет временному уравнению Шредингера

$$-iH\psi = \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (\text{I. 3})$$

Наблюдаемые значения любого оператора α суть его собственные значения a_i , определяемые уравнением

$$\alpha \phi_i(\mathbf{r}) = a_i \phi_i(\mathbf{r}), \quad (\text{I. 4})$$

где ϕ_i — соответствующие собственные функции. Они удовлетворяют соотношениям ортогональности

$$\int \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{ij}. \quad (I. 5)$$

Вероятность наблюдения собственного значения a_i равна $|A_i(t)|^2$, где $A_i(t)$ — коэффициент при $\phi_i(\mathbf{r})$ в следующем разложении волновой функции:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_i A_i(t) \phi_i(\mathbf{r}),$$

т. е.

$$A_i(t) = \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}. \quad (I. 6)$$

В матричном методе Гейзенберга функции ψ и ψ^* заменяются на *матрицы-столбцы и матрицы-строки*

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_k \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\psi_1^*, \psi_2^*, \dots, \psi_k^*, \dots). \quad (I. 7)$$

Их можно получить из ψ и ψ^* , выбрав какую-нибудь полную систему ортогональных функций $\eta_k(\mathbf{r})$ (в качестве таковых обычно выбираются собственные функции некоторого шредингеровского оператора β). Тогда

$$\psi_k = \int \eta_k^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r}. \quad (I. 8)$$

Аналогично динамические переменные представляются в виде *квадратных матриц*

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \dots \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & \dots & \alpha_{kl} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (I. 9)$$

где

$$\alpha_{kl} = \int \eta_k^*(\mathbf{r}) \alpha(\mathbf{r}, \nabla_r) \eta_l(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (\text{I. 10})$$

Матрица-столбец (I.7) удовлетворяет уравнению

$$-i \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots \\ H_{21} & H_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{I. 11})$$

аналогичному уравнению (I.3). Уравнение для собственных значений (I.4) принимает вид

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^i \\ \phi_2^i \\ \vdots \end{pmatrix} = a_i \begin{pmatrix} \phi_1^i \\ \phi_2^i \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (\text{I. 12})$$

а соотношение ортогональности (I.5) — вид

$$(\phi_1^{i*}, \phi_2^{i*}, \dots) \begin{pmatrix} \phi_1^j \\ \phi_2^j \\ \vdots \end{pmatrix} = \delta_{ij}. \quad (\text{I. 13})$$

Вероятность наблюдения величины a_i по-прежнему дается квадратом модуля $|A_i(t)|^2$, причем $A_i(t)$ определяется соотношением вида (I.6), в котором вместо ϕ_i и ψ подставлены матрица-строка и матрица-столбец, а интеграл отсутствует.

Развитый Дираком метод абстрактного векторного пространства представляет собой по сути дела обобщение векторов и тензоров в обычном пространстве. По этой причине обратимся сначала к последним. Рассмотрим обычную двумерную плоскость. Как хорошо известно, в ней можно построить векторы и тензоры, обладающие следующими свойствами:

1. Сложение:

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C} = \text{Некоторый вектор.} \quad (\text{I. 14 а})$$

2. Скалярное произведение \mathbf{A} и \mathbf{B} :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} &= |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \cos \theta_{AB} = c = \\ &= \text{„Компонента } \mathbf{A} \text{ вдоль } \mathbf{B}\text{“} = \\ &= \text{Число или „скаляр“,} \end{aligned} \quad (\text{I. 14 б})$$

а) нормированный вектор \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = |\mathbf{A}|^2 = 1;$$

б) ортогональные векторы \mathbf{A} и \mathbf{B} :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = 0;$$

в) ортонормированная система \mathbf{A}_i :

$$\mathbf{A}_i \cdot \mathbf{A}_j = \delta_{ij}.$$

3. Умножение на тензор \mathbf{D} :

$$\mathbf{B} = \mathbf{D}\mathbf{A} \quad (\text{растяжение и вращение вектора}). \quad (\text{I.14 в})$$

Для вычислений удобно выбрать произвольную пару ортогональных и нормированных („ортонормированных“) векторов в качестве „базисных“ — обозначим их \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 — и выразить все остальные векторы и тензоры через их компоненты или „представителей“ в этом базисе. Коль скоро это сделано, вектор превращается в матрицу-столбец, а тензор — в квадратную матрицу

$$\mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.15 а})$$

$$\mathbf{D} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{D}\mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{D}\mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{D}\mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{D}\mathbf{u}_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{I.15 б})$$

и с ними можно работать, используя обычные правила матричной алгебры. Подстановка их в соотношения (I.14) дает

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 + B_1 \\ A_2 + B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{I.16 а})$$

$$(A_1, A_2) \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = A_1 B_1 + A_2 B_2 = c, \quad (\text{I.16 б})$$

$$\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_{11}A_1 + D_{12}A_2 \\ D_{21}A_1 + D_{22}A_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.16 в})$$

Конкретные числа, которые появляются в матрицах, зависят, конечно, от того, какие именно векторы \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 были выбраны в качестве базиса.

Основные отличия между абстрактным векторным пространством Дирака и обычным пространством заключаются, во-первых, в том, что дираковское пространство имеет бесконечное число измерений, и, во-вторых, дираковские векторы (называемые кет-векторами $|A\rangle$) комплексны, и поэтому каждый из них имеет комплексно сопряженный бра-вектор

$\langle A | = | \bar{A} \rangle$. (Более точно, бра-вектор эрмитово сопряжен кет-вектору [14].) Дираковские векторы обладают свойствами, аналогичными свойствам обычных векторов; см. (I.14 а) — (I.14 в):

1. Сложение:

$$| A \rangle + | B \rangle = | C \rangle. \quad (\text{I. 17 а})$$

2. Скалярное произведение $| A \rangle$ и $| B \rangle$:

$$\langle A | B \rangle = c = \text{Число.} \quad (\text{I. 17 б})$$

а) нормированный вектор:

$$\langle A | A \rangle = 1;$$

б) ортогональные векторы $| A \rangle$ и $| B \rangle$:

$$\langle A | B \rangle = 0,$$

в) ортонормированная система $| A_i \rangle$:

$$\langle A_i | A_j \rangle = \delta_{ij}.$$

3. Умножение на линейный оператор α :

$$| B \rangle = \alpha | A \rangle. \quad (\text{I. 17 в})$$

Кроме того, в дираковской алгебре возникают еще три новых понятия, не существующих в обычной векторной алгебре:

4. Операторное произведение векторов $| A \rangle$ и $| B \rangle$:

$$\beta = | A \rangle \langle B | = \text{Линейный оператор,} \quad (\text{I. 17 г})$$

так как

$$\beta | R \rangle = | A \rangle \langle B | R \rangle = \text{Вектор.}$$

5. Умножение на единичный оператор:

Если $|\eta_i\rangle$ ортонормированная система, то оператор

$$\sum_i |\eta_i\rangle \langle \eta_i| \quad \left(\text{или} \int |\eta_i\rangle \langle \eta_i| d\eta_i \right)$$

единичный ¹⁾. В самом деле,

$$\sum_i |\eta_i\rangle \langle \eta_i | \eta_j \rangle = \sum_i |\eta_i\rangle \delta_{ij} = |\eta_j\rangle,$$

так что

$$\sum_i |\eta_i\rangle \langle \eta_i| = 1. \quad (\text{I. 17 д})$$

¹⁾ Чтобы этот оператор был единичным, требования ортонормированности, строго говоря, недостаточно. Необходимо еще, чтобы система функций была полной. —Прим. перев.

Поэтому получаем

$$\langle A | B \rangle = \sum_i \langle A | \eta_i \rangle \langle \eta_i | B \rangle.$$

6. Комплексное сопряжение:

Оператор α можно представить в виде

$$\alpha = \text{Re } \alpha + i \text{Im } \alpha,$$

так что

$$\bar{\alpha} = \text{Re } \alpha - i \text{Im } \alpha.$$

Далее $|\bar{A}\rangle = \langle A|$. Поэтому можно показать, что для получения комплексно сопряженного от любого произведения бра-векторов, кет-векторов и операторов необходимо заменить каждый множитель комплексно сопряженным с ним и обратить их порядок. Например,

$$\begin{aligned} \langle \overline{B|A} \rangle &= \langle A|B \rangle, & \langle \overline{P|\alpha} \rangle &= \bar{\alpha}|P \rangle, \\ \langle \overline{P|\alpha|B} \rangle &= \langle B|\bar{\alpha}|P \rangle, & \overline{\alpha\beta} &= \bar{\beta}\bar{\alpha} \quad \text{и т. д.} \end{aligned} \quad (\text{I.17e})$$

Используя эту новую алгебру, Дирак построил квантовую механику, совершенно аналогичную механикам Шредингера и Гейзенберга. Состояние системы описывается *абстрактным вектором* и комплексно сопряженным с ним вектором

$$|\psi(t)\rangle, \quad \langle \psi(t)|, \quad (\text{I.18})$$

а динамическим переменным отвечают *абстрактные линейные операторы*

$$\mathbf{r}, \quad \mathbf{p}, \quad \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad (\text{I.19})$$

например, оператор энергии

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (\text{I.20})$$

Вектор состояния удовлетворяет уравнению

$$-iH|\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle. \quad (\text{I.21})$$

Наблюдаемые значения α суть его собственные значения a_i , определяемые уравнением

$$\alpha|\phi_i\rangle = a_i|\phi_i\rangle, \quad (\text{I.22})$$

где собственные векторы $|\phi_i\rangle$ удовлетворяют соотношению ортонормировки¹⁾

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (\text{I.23})$$

¹⁾ Если оператор α самосопряженный. См. [38]. — Прим. перев.

Например, оператор координаты \mathbf{r} порождает уравнение на собственные значения

$$\mathbf{r} | \mathbf{r}_i \rangle = \mathbf{r}_i | \mathbf{r}_i \rangle, \quad (\text{I. 24})$$

причем

$$\langle \mathbf{r}_i | \mathbf{r}_j \rangle = \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

(отметим, что \mathbf{r}_i принимает непрерывный ряд значений). Вероятность наблюдения собственного значения a_i равна $|A_i(t)|^2$, причем

$$| \psi(t) \rangle = \sum_i A_i(t) | \phi_i \rangle, \quad A_i(t) = \langle \phi_i | \psi(t) \rangle. \quad (\text{I. 25})$$

Метод абстрактного векторного пространства Дирака находится в такой же связи с методами Шредингера и Гейзенберга, как обычная векторная алгебра [см. соотношения (I. 14)] с векторной алгеброй, выраженной в определенном базисе [см. соотношения (I. 16)]. Таким образом, волновая механика Шредингера представляет собой просто дираковскую формулировку в абстрактном векторном пространстве, выраженную в базисе собственных функций оператора координаты. Это означает, что базисные векторы [соответствующие векторам \mathbf{u}_1 и \mathbf{u}_2 в (I. 15)] суть собственные векторы $| \mathbf{r}_i \rangle$ оператора координаты \mathbf{r} , определяемые уравнением (I. 24), а все другие векторы и операторы выражены через свои компоненты вдоль векторов $| \mathbf{r}_i \rangle$. Такое представление часто называют „координатным“¹⁾. Можно показать, что шредингеровская волновая функция есть просто компонента дираковского вектора состояния $| \psi(t) \rangle$ в \mathbf{r} -представлении

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle, \quad \psi^*(\mathbf{r}, t) = \langle \psi(t) | \mathbf{r} \rangle, \quad (\text{I. 26})$$

что аналогично соотношению (I. 15а).

Шредингеровские операторы определяются следующим образом (см. [14, 46]):

$$\langle \mathbf{r}' | \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r} \rangle = \alpha(\mathbf{r}, -i\nabla_{\mathbf{r}}) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \quad (\text{I. 27})$$

что аналогично соотношению (I. 15б). Например, дираковское уравнение на собственные значения (I. 22) можно превратить в (I. 4), умножая (I. 22) слева на $\langle \mathbf{r} |$ и вставляя единичный оператор

$$1 = \int | \mathbf{r}_k \rangle \langle \mathbf{r}_k | d^3\mathbf{r}_k. \quad (\text{I. 28})$$

Это дает

$$\int d^3\mathbf{r}_k \langle \mathbf{r} | \alpha | \mathbf{r}_k \rangle \langle \mathbf{r}_k | \phi_i \rangle = a_i \langle \mathbf{r} | \phi_i \rangle,$$

¹⁾ Или \mathbf{r} -представлением. — Прим. перев.

или

$$\int d^3\mathbf{r}_k \alpha(\mathbf{r}_k, -i\nabla_{\mathbf{r}_k}) \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}) \langle \mathbf{r}_k | \phi_i \rangle = a_i \langle \mathbf{r} | \phi_i \rangle.$$

Следовательно,

$$\alpha(\mathbf{r}, -i\nabla_{\mathbf{r}}) \phi_i(\mathbf{r}) = a_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (\text{I. 29})$$

Подобным же образом, чтобы получить матричный метод Гейзенберга, надо просто выразить дираковские векторы и операторы в некотором произвольном базисе, скажем $|\eta_i\rangle$. Тогда, согласно (I. 28), компонента ψ_k из (I. 7) есть

$$\psi_k = \langle \eta_k | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \langle \eta_k | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \eta_k^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad (\text{I. 30})$$

что в точности совпадает с соотношением (I. 8), а матричный элемент оператора α_{kl} из (I. 9) есть

$$\begin{aligned} \alpha_{kl} &= \langle \eta_k | \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \eta_l \rangle = \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \langle \eta_k | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}) | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \eta_l \rangle = \\ &= \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \eta_k^*(\mathbf{r}') \alpha(\mathbf{r}, -i\nabla_{\mathbf{r}}) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \eta_l(\mathbf{r}) = \\ &= \int d^3\mathbf{r} \eta_k^*(\mathbf{r}) \alpha(\mathbf{r}, -i\nabla_{\mathbf{r}}) \eta_l(\mathbf{r}), \quad (\text{I. 31}) \end{aligned}$$

что совпадает с соотношением (I. 10). Уравнение (I. 31) показывает, что $\langle \eta_k | \alpha | \eta_l \rangle$ есть стенографический способ записи обычных гейзенберговских матричных элементов.

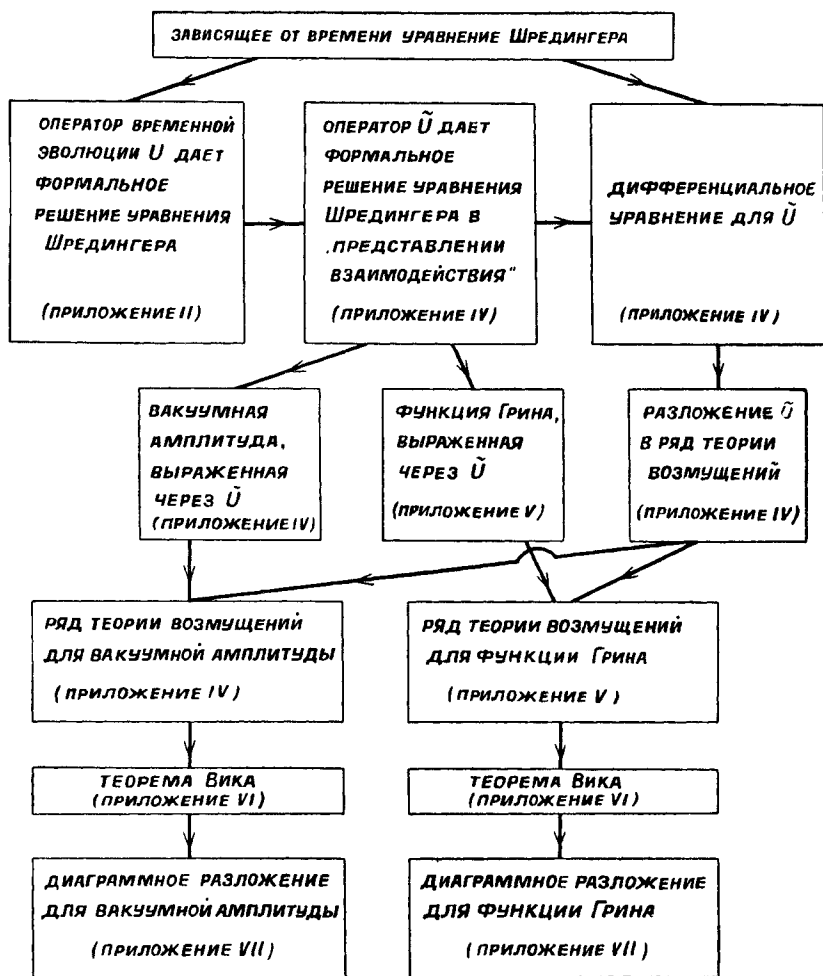
Приложение II

ОПЕРАТОР ВРЕМЕННОЙ ЭВОЛЮЦИИ $U(t)$

Это приложение служит первым шагом в лабиринте рассуждений (приложения II — VII), необходимых для вывода диаграммного разложения вакуумной амплитуды и функции Грина на основе зависящего от времени уравнения Шредингера. Чтобы свести к минимуму риск заболеть по дороге аппендицитом¹⁾, мы начнем с построения диаграммы этого

¹⁾ Игра слов: по-английски Appendicitis — аппендицит, Appendix — приложение. — *Прим. перев.*

лабиринта. (Отметим, что приложение III сюда не включено, хотя некоторые его результаты используются.)



Займемся теперь оператором временной эволюции $U(t-t_0)$. Пусть $\Psi(t_0)$ и $\Psi(t)$ — волновые функции в начальный момент t_0 и в более поздний момент t . Тогда оператор временной эволюции определяется как оператор, который, действуя на $\Psi(t_0)$, переводит ее в $\Psi(t)$:

$$\Psi(t) = U(t-t_0) \Psi(t_0), \quad (\text{II. 1a})$$

или в обозначениях Дирака

$$|\Psi(t)\rangle = U(t-t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \quad (\text{II. 16})$$

Мы можем найти формальное выражение для $U(t-t_0)$, используя тот факт, что функция Ψ удовлетворяет временному уравнению Шредингера

$$-iH\Psi(t) = \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t), \quad (\text{II. 2a})$$

или в обозначениях Дирака

$$-iH|\Psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle. \quad (\text{II. 2б})$$

Здесь предполагается, что гамильтониан H не зависит от времени. Тогда

$$U(t-t_0) = e^{-iH(t-t_0)} \equiv 1 - iH(t-t_0) + \frac{t^2}{2!} H^2(t-t_0)^2 + \dots; \quad (\text{II. 3})$$

смысл экспоненциального оператора определяется приведенным разложением. Правильность разложения (II. 3) можно проверить, подставив его в соотношение (II. 1б) и продифференцировав. Получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle &= \frac{\partial}{\partial t}U(t-t_0)|\Psi(t_0)\rangle = \\ &= \frac{\partial}{\partial t}e^{-iH(t-t_0)}|\Psi(t_0)\rangle = \\ &= -iH|\Psi(t)\rangle, \end{aligned} \quad (\text{II. 4})$$

что находится в соответствии с уравнением (II. 2б).

Посмотрим, как действует оператор $U(t-t_0)$. В качестве примера возьмем систему, которая в начальный момент $t_0=0$ находится в состоянии с волновой функцией Ψ_n — собственной функцией гамильтониана H , так что

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle. \quad (\text{II. 5})$$

Требуется найти функцию

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi_n\rangle. \quad (\text{II. 6})$$

Она равна

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \left[1 - iHt + \frac{t^2}{2!} H^2 t^2 + \dots\right]|\Psi_n\rangle = \\ &= \left[1 - iE_n t + \frac{t^2}{2!} E_n^2 t^2 + \dots\right]|\Psi_n\rangle = \\ &= e^{-iE_n t}|\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle e^{-iE_n t}. \end{aligned} \quad (\text{II. 7})$$

Здесь же будет уместным вычислить и функцию

$$\langle \Psi(t) | = \langle \Psi_n | e^{iHt}. \quad (\text{II. 8})$$

Это можно сделать, воспользовавшись операцией комплексного сопряжения (I. 17e):

$$\langle \Psi(t) | = \overline{|\Psi(t)\rangle} = \overline{e^{-iHt} |\Psi_n\rangle} = \overline{e^{-iE_n t} |\Psi_n\rangle} = e^{+iE_n t} \langle \Psi_n |. \quad (\text{II. 9})$$

Приложение III

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ С ПОМОЩЬЮ ВАКУУМНОЙ АМПЛИТУДЫ

(Читатели, руководствующиеся диаграммой, приведенной в приложении II, при первом чтении могут перескочить через настоящее приложение.)

Мы хотим доказать, что

$$E_0 = W_0 + i \left[\frac{d}{dt} \ln R(t) \right]_{t \rightarrow \infty (1-i\eta)}, \quad (\text{III. 1})$$

где E_0 и W_0 суть энергии основного состояния системы с взаимодействием и без него соответственно, а η — положительная бесконечно малая величина, такая, что $\eta \times \infty = \infty$. Начнем с вакуумной амплитуды, определенной соотношением (5.3). Ее можно представить в виде

$$R(t) = e^{+iW_0 t} \langle \Phi_0 | U(t) | \Phi_0 \rangle = e^{+iW_0 t} \langle \Phi_0 | e^{-iHt} | \Phi_0 \rangle, \quad (\text{III. 2})$$

где использовано выражение (II. 3) для оператора временной эволюции. Перепишем теперь это выражение с помощью точных собственных функций $|\Psi_n\rangle$ гамильтониана H . Воспользовавшись тем, что

$$\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$$

есть единичный оператор [см. (I. 17д)], находим

$$\begin{aligned} R(t) &= e^{iW_0 t} \sum_n \langle \Phi_0 | e^{-iHt} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Phi_0 \rangle = \\ &= e^{iW_0 t} \sum_n \langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Phi_0 \rangle e^{-iE_n t}. \end{aligned} \quad (\text{III. 3})$$

Беря логарифм от обеих частей равенства, дифференцируя и переходя к пределу, получаем

$$\left[\frac{d}{dt} \ln R(t) \right]_{T \rightarrow \infty}^{T(1-i\eta)} = iW_0 + \left[\frac{\sum_n |\langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle|^2 e^{-iE_n t} (-iE_n)}{\sum_n |\langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle|^2 e^{-iE_n t}} \right]_{T \rightarrow \infty}^{T(1-i\eta)} =$$

$$= iW_0 + \left[\frac{\sum_n |\langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle|^2 (-iE_n) e^{-iE_n T} e^{-E_n \eta T}}{\sum_n |\langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle|^2 e^{-iE_n T} e^{-E_n \eta T}} \right]_{T \rightarrow \infty}^{T(1-i\eta)}. \quad (\text{III. 4})$$

Так как по определению величина $\eta T \rightarrow \infty$ при $T \rightarrow \infty$, все экспоненты обращаются в нуль. Медленнее всего стремится к нулю экспонента с наименьшим значением E_n , т. е. с E_0 ; поэтому играет роль только слагаемое с $n=0$, что дает

$$\left[\frac{d}{dt} \ln R(t) \right]_{T \rightarrow \infty}^{T(1-i\eta)} = iW_0 +$$

$$+ \frac{|\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle|^2 (-iE_0) e^{-iE_0 \infty} e^{-E_0 \eta \times \infty}}{|\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle|^2 e^{-iE_0 \infty} e^{-E_0 \eta \times \infty}} = iW_0 - iE_0. \quad (\text{III. 5})$$

Отсюда немедленно следует теорема (III. 1).

Необходимо отметить, что переход к пределу в соотношениях (III. 4) и (III. 5) возможен, только если

$$\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle \neq 0. \quad (\text{III. 6})$$

Если симметрия волновых функций $|\Psi_0\rangle$ и $|\Phi_0\rangle$, отвечающих основному состоянию системы с взаимодействием и без него, оказывается различной, то эти функции взаимно ортогональны, т. е. $\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle = 0$ и теорема (III. 1) не выполняется. Это отвечает ситуации, когда исходная однородная система без взаимодействия претерпевает *фазовый переход*, обусловленный взаимодействием. Так обстоит дело, например, если включить притягивающее взаимодействие между ранее не взаимодействовавшими электронами в электронном газе. В этом случае произойдет фазовый переход в сверхпроводящее состояние и формулу (III. 1) нельзя будет использовать для получения энергии нового основного состояния [45].

Приведенное в этом приложении доказательство взято из книги [64] и было выбрано нами из-за его математической простоты. Более „физический“ путь вывода той же формулы связан с использованием „адиабатической теоремы“ (см. [61]). При этом предполагается, что 1) в системе без

взаимодействия, находящейся в основном состоянии, происходит медленное (адиабатическое) включение потенциала взаимодействия, не приводящее к переходам в возбужденные состояния, и 2) основное состояние системы с взаимодействием получается непрерывным образом из основного состояния системы без взаимодействия по мере включения потенциала (адиабатическая гипотеза). В первом методе предположению 1 соответствует предельный переход с комплексным временем, так как именно наличие мнимой добавки исключает все возбужденные состояния, предположению 2 отвечает условие $\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle \neq 0$. Действительно, последнее подразумевает перекрытие волновых функций основного состояния системы в присутствии взаимодействия и без него.

Приложение IV

ОПЕРАТОР $\tilde{U}(t)$ И ЕГО РАЗЛОЖЕНИЕ

1. Нулевая температура

Оператор \tilde{U} приходится двоюродным братом оператору временной эволюции U (приложение II). Очень часто так называют его самого, ибо, как мы увидим, он определяет зависимость волновой функции от времени в „представлении взаимодействия“. Оператор \tilde{U} полезен тем, что непосредственно через \tilde{U} выражаются вакуумная амплитуда R и функция Грина G . Это означает, что если бы мы нашли разложение для \tilde{U} в ряд теории возмущений, то автоматически получили бы и разложение для R и G .

Оператор \tilde{U} определяется выражением

$$\tilde{U}(t, t_0) = e^{iH_0 t} U(t - t_0) e^{-iH_0 t_0} = e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0}. \quad (\text{IV. 1})$$

Следует подчеркнуть, что здесь нельзя просто сложить показатели экспонент, так как операторы H и H_0 не коммутируют друг с другом! В самом деле, используя разложение (II. 3), получаем

$$e^{A+B} = 1 + (A+B) + \frac{1}{2!} (A^2 + 2AB + B^2) + \dots,$$

в то время как

$$e^{A+B} = 1 + (A+B) + \frac{1}{2!} (A^2 + AB + BA + B^2) + \dots \quad (\text{IV. 2})$$

Эти операторы не равны, поскольку $AB \neq BA$.

Разложение для \tilde{U} можно получить, итерируя интегральное уравнение, вытекающее из дифференциального уравнения

для \tilde{U} ; последнее же получается из уравнения Шредингера. Первый шаг состоит в переходе в уравнении Шредингера

$$-i(H_0 + H_1)|\Psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle \quad (\text{IV. 3})$$

и его формальном решении (II. 1)

$$|\Psi(t)\rangle = U(t - t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (\text{IV. 4})$$

к представлению взаимодействия. Для произвольного оператора \hat{O} это преобразование имеет вид (см. [58])

$$\hat{O}(t) = e^{+iH_0 t} \hat{O} e^{-iH_0 t}, \quad (\text{IV. 5})$$

а для произвольного вектора состояния $|\Psi\rangle$ находим

$$|\hat{\Psi}(t)\rangle = e^{+iH_0 t} |\Psi(t)\rangle. \quad (\text{IV. 6})$$

Цель преобразования состоит в том, чтобы избавиться от явного присутствия оператора H_0 в уравнении (IV. 3). Воспользовавшись указанным преобразованием, можем привести уравнение (IV. 3) к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} |\hat{\Psi}(t)\rangle = -i\hat{H}_1(t) |\hat{\Psi}(t)\rangle, \quad (\text{IV. 7})$$

в чем легко убедиться непосредственной проверкой. Вместо формулы (IV. 4) мы получаем теперь

$$|\hat{\Psi}(t)\rangle = \tilde{U}(t, t_0) |\hat{\Psi}(t_0)\rangle. \quad (\text{IV. 8})$$

[Отметим, что, согласно (IV. 1) и (IV. 5), $\tilde{U} \neq \hat{U}$!] Подставляя соотношение (IV. 8) в уравнение (IV. 7) и исключая $|\hat{\Psi}(t_0)\rangle$, приходим к основному уравнению для оператора \tilde{U}

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{U}(t, t_0) = -i\hat{H}_1(t) \tilde{U}(t, t_0). \quad (\text{IV. 9})$$

Разложение для $\tilde{U}(t, t_0)$ можно получить, интегрируя уравнение (IV. 9), а затем итерируя его:

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t, t_0) &= \tilde{U}(t_0, t_0) - i \int_{t_0}^t \hat{H}_1(t_1) \tilde{U}(t_1, t_0) dt_1 = \\ &= \tilde{U}(t_0, t_0) - i \tilde{U}(t_0, t_0) \int_{t_0}^t \hat{H}_1(t_1) dt_1 + \\ &+ i^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}_1(t_1) \hat{H}_1(t_2) \tilde{U}(t_2, t_0) = \\ &= 1 - i \int_{t_0}^t \hat{H}_1(t_1) dt_1 + i^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}_1(t_1) \hat{H}_1(t_2) + \dots \quad (\text{IV. 10}) \end{aligned}$$

Согласно (IV. 1), здесь $\tilde{U}(t_0, t_0) = 1$. Порядок сомножителей существен, поскольку операторы $\hat{H}_1(t_1)$ и $\hat{H}_1(t_2)$ не коммутируют друг с другом. Дайсон показал (см. [61]), что слагаемое n -го порядка можно переписать так, чтобы все переменные t_i принимали значения от t_0 до t :

$$\int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n) = \\ = \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T_D [\hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n)], \quad (\text{IV. 11})$$

где оператор T_D означает „дайсоновское упорядочение во времени“, т. е. установление такого порядка операторов в квадратных скобках, чтобы временные аргументы их уменьшались слева направо. Таким образом, во втором порядке мы имеем

$$T_D [\hat{H}_1(t_1) \hat{H}_1(t_2)] = \theta_{t_1-t_2} \hat{H}_1(t_1) \hat{H}_1(t_2) + \theta_{t_2-t_1} \hat{H}_1(t_2) \hat{H}_1(t_1), \quad (\text{IV. 12})$$

где функция θ определена соотношением (5.25). Так как мы предполагаем, что гамильтониан H содержит четные степени операторов рождения и уничтожения, оператор T_D здесь совпадает с обычным виновским оператором упорядочения во времени (9.4). Поэтому в дальнейшем индекс D мы будем опускать. Подстановка соотношения (IV. 11) в (IV. 10) приводит к следующей форме разложения для $\tilde{U}(t, t_0)$:

$$\tilde{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T \{ \hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n) \}. \quad (\text{IV. 13})$$

2. Конечные температуры

Для случая конечных температур оператор \tilde{U} можно определить и разложить в ряд совершенно так же, как это делалось в случае нулевой температуры. Он используется для нахождения термодинамических функций Грина и вакуумной амплитуды при конечных температурах (см. гл. 14).

Как показано в приложении II, при $T=0$ оператор \tilde{U} и его диаграммное разложение можно получить из временного

уравнения Шредингера. В случае $T \neq 0$ основой всего служит уравнение Блоха (14.21)

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = -(H - \mu N)\rho. \quad (\text{IV. 14})$$

Его можно вывести из уравнения Шредингера (IV. 3) путем следующих замен:

$$it \rightarrow \beta, \quad H \rightarrow H - \mu N, \quad \Psi \rightarrow \rho. \quad (\text{IV. 15})$$

Поэтому оператор \tilde{U} при $T \neq 0$ можно получить из (IV. 1), совершив указанные замены:

$$\tilde{U}(\beta) = e^{+\beta(H_0 - \mu N)} e^{-\beta(H - \mu N)}, \quad (\text{IV. 16})$$

где $it_0 \rightarrow \beta_0$ положено равным нулю. (Отметим, что, поскольку $\beta_0 = 1/kT_0$, эта величина никогда не может быть отрицательной.) Подобным же образом определяется „представление взаимодействия“ для произвольного оператора \hat{O} при $T \neq 0$

$$\hat{O}(\beta) = e^{+\beta(H_0 - \mu N)} \hat{O} e^{-\beta(H_0 - \mu N)}, \quad (\text{IV. 17})$$

например, имеем

$$\hat{H}_1(\tau) = e^{\tau(H_0 - \mu N)} H_1 e^{-\tau(H_0 - \mu N)}. \quad (\text{IV. 18})$$

Наконец, произведя замены (IV. 15) в разложении (IV.13), мы приходим к разложению оператора \tilde{U} при $T \neq 0$

$$\tilde{U}(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T \{ \hat{H}_1(\tau_1) \dots \hat{H}_1(\tau_n) \}. \quad (\text{IV. 19})$$

Приложение V

РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ОДНОЧАСТИЧНОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА И ВАКУУМНОЙ АМПЛИТУДЫ

1. Разложение для функции Грина при $T = 0$

Одночастичную функцию Грина можно разложить в ряд теории возмущений с помощью оператора \tilde{U} , определенного выражением (IV. 1). Мы ограничимся разложением функции $G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1)$, так как случай функции G^- можно рассмотреть подобным же образом. Используя метод, изложен-

ный в работе [64], докажем сперва, что функцию G^+ можно выразить через \tilde{U} следующим образом:

$$G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = \lim_{\substack{T_1 \rightarrow -\infty (1-t\eta) \\ T_2 \rightarrow +\infty (1-t\eta)}} Q(T_2, T_1, k_2, k_1, t_2 - t_1), \quad (\text{V. 1})$$

где

$$Q = \frac{-i \langle \Phi_0 | T \{ \tilde{U}(T_2, T_1) \hat{c}_{k_2}(t_2) \hat{c}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{U}(T_2, T_1) | \Phi_0 \rangle}. \quad (\text{V. 2})$$

Так как мы имеем дело с функцией G^+ , то в выражении (V.2) следует полагать $t_2 > t_1$; далее мы считаем, что $T_2 > t_2$, $T_1 < t_1$, т. е.

$$T_2 > t_2 > t_1 > T_1. \quad (\text{V. 3})$$

Оператор \hat{c}_k есть обычный оператор c_k в представлении взаимодействия; см. формулу (IV.5). Бесконечно малая величина η такова, что $\eta \times \infty = \infty$.

Напомним, что функция G^+ определяется выражением (9.6)

$$G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i \theta_{t_2 - t_1} \langle \Psi_0 | c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^\dagger(t_1) | \Psi_0 \rangle. \quad (\text{V. 4})$$

Поэтому для доказательства теоремы (V.1) нам придется исхитриться и от операторов \hat{c}_k в (V.2) в представлении взаимодействия перейти к фигурирующим в (V.4) операторам c_k в представлении Гейзенберга (9.3), а от волновой функции основного состояния системы без взаимодействия $|\Phi_0\rangle$ перейти к волновой функции $|\Psi_0\rangle$ с учетом взаимодействия. Начнем с того, что разобьем оператор \tilde{U} на произведение

$$\tilde{U}(T_2, T_1) = \tilde{U}(T_2, t_2) \tilde{U}(t_2, t_1) \tilde{U}(t_1, T_1). \quad (\text{V. 5})$$

Справедливость такого разбиения следует из определения (IV.1). Подставляя это в соотношение (V.2) и перегруппировывая члены в соответствии с порядком следования времен (V.3) (после чего символ T можно опустить), получаем

$$Q = \frac{-i \langle \Phi_0 | \tilde{U}(T_2, t_2) \hat{c}_{k_2}(t_2) \tilde{U}(t_2, t_1) \hat{c}_{k_1}^\dagger(t_1) \tilde{U}(t_1, T_1) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \tilde{U}(T_2, T_1) | \Phi_0 \rangle}. \quad (\text{V. 6})$$

Представив оператор $\hat{c}_k(t)$ в явном виде и опять используя выражение (IV.1) для \tilde{U} , можем выразить величину Q не через оператор \tilde{U} , а через U :

$$Q = \frac{-ie^{+iW_0(T_2-T_1)} \langle \Phi_0 | U(T_2-t_2) c_{k_2} U(t_2-t_1) c_{k_1}^\dagger U(t_1-T_1) | \Phi_0 \rangle}{e^{+iW_0(T_2-T_1)} \langle \Phi_0 | U(T_2-T_1) | \Phi_0 \rangle}. \quad (\text{V. 7})$$

Учитывая далее выражение (II.3) для U , получаем

$$Q = \frac{-i \langle \Phi_0 | e^{-iHT_2} c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^\dagger(t_1) e^{+iHT_1} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | e^{-iHT_2} e^{+iHT_1} | \Phi_0 \rangle}, \quad (\text{V. 8})$$

где теперь фигурируют операторы c_k в представлении Гейзенберга. Вставляя в это выражение единичный оператор, записанный с помощью точных собственных функций гамильтониана H , $\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$, находим

$$Q = \frac{-i \sum_{n,m} \langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle \langle \Psi_m | \Phi_0 \rangle e^{-i(E_n T_2 - E_m T_1)} \langle \Psi_n | c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^\dagger(t_1) | \Psi_m \rangle}{\sum_n \langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Phi_0 \rangle e^{-i(E_n T_2 - E_n T_1)}}. \quad (\text{V. 9})$$

Предельный переход осуществляется таким же образом, как и в формулах (III.4) и (III.5). Из всех слагаемых остаются лишь те, у которых $m=0$ и $n=0$; эти слагаемые в числителе и знаменателе сокращаются и теорема (V.1), таким образом, доказывается.

Итак, разложение для $G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1)$ в ряд теории возмущений получается просто путем подстановки разложения (IV.13) для \tilde{U} в формулы (V.1) и (V.2)

$$G(k_2, k_1, t_2 - t_1) = \frac{\left\{ -i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt'_1 \dots \int dt'_n \times \right.}{\left. \times \langle \Phi_0 | T \{ \hat{H}_1(t'_1) \dots \hat{H}_1(t'_n) \hat{c}_{k_2}(t_2) \hat{c}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | \Phi_0 \rangle \right\}}{\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt'_1 \dots \int dt'_n \times \right.}{\left. \times \langle \Phi_0 | T \{ \hat{H}_1(t'_1) \dots \hat{H}_1(t'_n) \} | \Phi_0 \rangle \right\}}. \quad (\text{V. 10})$$

Верхний индекс „+“ здесь опущен, так как результат (V.10) остается справедливым и для функции G^- .

Следует особо подчеркнуть, что для получения путем предельного перехода из соотношения (V.9) разложения (V.1) необходимо соблюдать условие (III.6), т. е. для того, чтобы разложение G в ряд теории возмущений было возможно, обязательно должно выполняться условие (см. § 4 гл. 15)

$$\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle \neq 0. \quad (\text{V. 11})$$

2. Разложение для вакуумной амплитуды при $T=0$

Вакуумную амплитуду легко выразить через оператор \tilde{U}

$$\begin{aligned}
 R(t-t_0) &= e^{iW_0(t-t_0)} \langle \Phi_0 | U(t-t_0) | \Phi_0 \rangle = \\
 &= e^{iW_0(t-t_0)} \langle \Phi_0 | e^{-iH_0 t} e^{+iH_0 t} U(t-t_0) e^{-iH_0 t_0} e^{+iH_0 t_0} | \Phi_0 \rangle = \\
 &= \langle \Phi_0 | \tilde{U}(t, t_0) | \Phi_0 \rangle; \quad (V. 12)
 \end{aligned}$$

при этом мы использовали соотношения (II. 7) и (II. 9). Следовательно, взяв матричный элемент от обеих частей разложения (IV. 13), мы получим искомое разложение вакуумной амплитуды в ряд теории возмущений

$$R(t-t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n \langle \Phi_0 | T \{ \hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n) \} | \Phi_0 \rangle. \quad (V. 13)$$

3. Разложение в случае конечных температур

Как уже упоминалось в § 3 гл. 14, разложение термодинамической функции Грина

$$\mathcal{G}(k_2, k_1, \tau_2 - \tau_1) = -i \langle T \{ c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^\dagger(\tau_1) \} \rangle \quad (V. 14)$$

можно получить точно таким же образом, как и функции Грина при $T=0$. По аналогии с (V. 1) и (V. 2) мы получаем

$$\mathcal{G}(k_2, k_1, \tau_2 - \tau_1) = \frac{-i \langle T \{ \tilde{U}(\beta) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^\dagger(\tau_1) \} \rangle_0}{\langle \tilde{U}(\beta) \rangle_0}, \quad (V. 15)$$

(при $\tau_2 > \tau_1$)

где символ $\langle \rangle_0$ обозначает усреднение по ансамблю не взаимодействующих систем при температуре T , а оператор $\tilde{U}(\beta)$ определяется формулой (IV. 16). Тогда, используя разложение (IV. 19), находим

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}(k_2, k_1, \tau_2 - \tau_1) &= \\
 &= \frac{\left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau'_1 \dots \int_0^\beta d\tau'_n \times \right. \\
 &\quad \left. \times \langle T \{ \hat{H}_1(\tau'_1) \dots \hat{H}_1(\tau'_n) c_{k_2}(\tau_2) c_{k_1}^\dagger(\tau_1) \} \rangle_0 \right\}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau'_1 \dots \int_0^\beta d\tau'_n \langle T \{ \hat{H}_1(\tau'_1) \dots \hat{H}_1(\tau'_n) \} \rangle_0}. \quad (V. 16)
 \end{aligned}$$

Отметим еще полезное выражение (14.40) для вакуумной амплитуды при конечной температуре

$$\mathcal{R}(\beta) = \langle \tilde{U}(\beta) \rangle_0. \quad (\text{V. 17})$$

Эта величина, очевидно, есть просто знаменатель в выражениях (V. 15) и (V. 16), так что для нее мы имеем разложение

$$\mathcal{R}(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau'_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau'_n \langle T \{ \hat{H}_1(\tau'_1) \dots \hat{H}_1(\tau'_n) \} \rangle_0. \quad (\text{V. 18})$$

Приложение VI

ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ПОМОЩЬЮ ТЕОРЕМЫ ВИКА

Чтобы получить что-нибудь хорошее из разложения (V. 13) для $R(t-t_0)$ или из разложения (V. 10) для $G(k_2, k_1, t_2-t_1)$, надо вычислить входящие в эти выражения матричные элементы. Сперва мы сделаем это утомительным обычным методом, а затем покажем, как можно сэкономить время, используя некоторый трюк, называемый „теоремой Вика“.

Рассмотрим для простоты систему из N невзаимодействующих частиц во внешнем поле, гамильтониан которой есть

$$H = H_0 + H_1,$$

где

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad H_1 = \sum_{k,l} V_{kl} c_k^\dagger c_l. \quad (\text{VI. 1})$$

В представлении взаимодействия H_1 имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(t) &= e^{+iH_0 t} \sum_{k,l} V_{kl} c_k^\dagger c_l e^{-iH_0 t} = \\ &= \sum_{k,l} V_{kl} e^{+iH_0 t} c_k^\dagger e^{-iH_0 t} e^{+iH_0 t} c_l e^{-iH_0 t} = \\ &= \sum_{k,l} V_{kl} \hat{c}_k^\dagger(t) \hat{c}_l(t) = \\ &= \sum_{k,l} V_{kl} [\hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_l(t) + \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{b}_l^\dagger(t) + \hat{b}_k(t) \hat{a}_l(t) + \hat{b}_k(t) \hat{b}_l^\dagger(t)]. \end{aligned} \quad (\text{VI. 2})$$

Зависимость операторов $\hat{c}_k^\dagger(t)$ и $\hat{c}_l(t)$ от времени можно найти следующим образом. Мы имеем

$$\begin{aligned}\hat{c}_l(t) &= e^{+iH_0 t} c_l e^{-iH_0 t} = \\ &= c_l + i[H_0, c_l]t + \frac{i^2}{2!} [H_0, [H_0, c_l]]t^2 + \dots; \quad (\text{VI.3})\end{aligned}$$

здесь мы использовали разложение экспоненты (II.3). Для коммутатора получаем

$$[H_0, c_l] = \sum_k \varepsilon_k (c_k^\dagger c_k c_l - c_l c_k^\dagger c_k). \quad (\text{VI.4})$$

Однако, согласно соотношению (7.32),

$$c_k^\dagger c_k c_l = -c_k^\dagger c_l c_k = [-\delta_{k,l} + c_l c_k^\dagger] c_k. \quad (\text{VI.5})$$

Поэтому

$$[H_0, c_l] = -\sum_k \varepsilon_k \delta_{k,l} c_k = -\varepsilon_l c_l. \quad (\text{VI.6})$$

Подставляя этот результат в разложение (VI.3), находим

$$\hat{c}_l(t) = c_l - i\varepsilon_l t c_l + \frac{i^2}{2!} \varepsilon_l^2 t^2 c_l + \dots,$$

или

$$\hat{c}_l(t) = c_l e^{-i\varepsilon_l t}. \quad (\text{VI.7})$$

Подобным же образом получаем выражения для операторов $\hat{a}(t)$ и $\hat{b}(t)$

$$\begin{aligned}\hat{a}_k^\dagger(t) &= a_k^\dagger e^{+i\varepsilon_k t}, & \hat{b}_k^\dagger(t) &= b_k^\dagger e^{-i\varepsilon_k t}, \\ \hat{a}_k(t) &= a_k e^{-i\varepsilon_k t}, & \hat{b}_k(t) &= b_k e^{+i\varepsilon_k t}.\end{aligned} \quad (\text{VI.8})$$

Воспользуемся теперь этими результатами для вычисления некоторых матричных элементов, возникающих в числителе разложения (V.10). Слагаемое нулевого порядка достаточно просто. Положим $t_2 > t_1$. Тогда для $k_1 > k_F$ и $k_2 > k_F$

$$\begin{aligned}M^{(0)} &= \langle \Phi_0 | T \{ \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | \Phi_0 \rangle = \\ &= \langle \Phi_0 | a_{k_2} a_{k_1}^\dagger | \Phi_0 \rangle e^{-i(\varepsilon_{k_2} t_2 - \varepsilon_{k_1} t_1)} = \\ &= \delta_{k_2, k_1} e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2 - t_1)}\end{aligned} \quad (\text{VI.9})$$

[см. (7.35)]. Это выражение совпадает с функцией Грина свободной частицы $iG_0^\dagger(k_2, k_1, t_2 - t_1)$.

Пусть $t_2 > t'_1 > t_1$ (в дальнейшем вместо t'_1 мы будем писать t), а $k_1 > k_F$ и $k_2 > k_F$, тогда слагаемое первого порядка в числителе (V.10) имеет вид

$$M^{(1)} = \langle \Phi_0 | T \{ \hat{H}_1(t) \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | \Phi_0 \rangle = \\ = \sum_{k, l} V_{kl} [\langle 0 | T \{ a_k^\dagger(t) \hat{a}_l(t) \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | 0 \rangle + \\ + \dots + \langle 0 | T \{ \hat{b}_k(t) \hat{b}_l^\dagger(t) \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | 0 \rangle], \quad (\text{VI.9a})$$

или, используя соотношения (V.2) и (V.7), получаем

$$M^{(1)} = \sum_{k, l} V_{kl} \left[\begin{array}{l} \langle 0 | a_{k_2} a_k^\dagger a_l a_{k_1}^\dagger | 0 \rangle + \\ + \langle 0 | a_{k_2} a_k^\dagger b_l^\dagger a_{k_1}^\dagger | 0 \rangle + \\ + \langle 0 | a_{k_2} b_k a_l a_{k_1}^\dagger | 0 \rangle + \\ + \langle 0 | a_{k_2} b_k b_l^\dagger a_{k_1}^\dagger | 0 \rangle \end{array} \right] e^{-i(\varepsilon_{k_2} t_2 - \varepsilon_k t + \varepsilon_l t - \varepsilon_{k_1} t_1)}, \quad (\text{VI.10})$$

где символ $|0\rangle$ обозначает ферми-вакуум. Матричные элементы вычисляются с помощью соотношений коммутации (7.73) путем систематического протаскивания всех операторов уничтожения направо, где они, действуя на вакуум, согласно формуле (4.20), дают нуль. Таким образом, первый матричный элемент равен

$$\langle 0 | a_{k_2} a_k^\dagger a_l a_{k_1}^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | a_{k_2} a_k^\dagger [\delta_{l, k_1} - a_{k_1}^\dagger a_l] | 0 \rangle = \\ = \langle 0 | a_{k_2} a_k^\dagger | 0 \rangle \delta_{l, k_1} - \langle 0 | a_{k_2} a_k^\dagger a_{k_1}^\dagger a_l | 0 \rangle = \\ = \delta_{k_2, k} \delta_{l, k_1} - 0. \quad (\text{VI.11})$$

Второе и третье слагаемые в выражении (VI.10) равны нулю, так как числа уничтожаемых и рождаемых в них частиц и дырок не одинаковы. Четвертое же слагаемое есть

$$\langle 0 | a_{k_2} b_k b_l^\dagger a_{k_1}^\dagger | 0 \rangle = \delta_{k_1, k_2} \delta_{k, l}. \quad (\text{VI.12})$$

Следовательно, окончательный результат имеет вид

$$M^{(1)} = V_{k_2 k_1} e^{-i\varepsilon_{k_2}(t_2-t)} e^{-i\varepsilon_{k_1}(t-t_1)} + \sum_k V_{kk} e^{-i\varepsilon_{k_1}(t_2-t_1)} \delta_{k_1, k_2}. \quad (\text{VI.13})$$

Обладая неограниченным терпением, бесконечной энергией и полным отсутствием воображения, мы могли бы слепо продираться вперед и вычислять слагаемое второго, третьего и более высоких порядков, тупо используя соотношения коммутации, как это делали выше. Существует, однако, значительно более простой способ, в котором используется теорема Вика,

Теорема Вика основывается, по сути дела, на той же идее протаскивания операторов уничтожения направо, где они, действуя на ферми-вакуум $|0\rangle$, дают нуль. Основным понятием, используемым в этой теореме, служит *нормальное произведение операторов* — в нем все операторы уничтожения стоят справа. Оно определяется следующим образом:

$$N[ABC^{\dagger}DF^{\dagger}G^{\dagger}\dots] = (-1)^P [C^{\dagger}F^{\dagger}G^{\dagger}\dots ABD\dots]. \quad (\text{VI.14})$$

Здесь P — число перестановок соседних операторов, которые необходимо сделать, чтобы перейти от порядка, заданного в левой части равенства, к „нормальному порядку“ в правой части равенства. Например,

$$\begin{aligned} N[\hat{a}_k(t_3)\hat{b}_l^{\dagger}(t_2)\hat{a}_m^{\dagger}(t_1)] &= +\hat{b}_l^{\dagger}(t_2)\hat{a}_m^{\dagger}(t_1)\hat{a}_k(t_3) = \\ &= -\hat{a}_m^{\dagger}(t_1)\hat{b}_l^{\dagger}(t_2)\hat{a}_k(t_3). \end{aligned} \quad (\text{VI.15})$$

Отметим, что для нормального произведения операторов временной порядок несуществен, так же как несущественно и взаимное расположение различных операторов рождения (или уничтожения), коль скоро мы снабдили его правильным знаком.

Важная роль нормального произведения операторов связана с тем обстоятельством, что

$$\langle 0|N[ABC^{\dagger}D\dots]|0\rangle = 0. \quad (\text{VI.16})$$

При наличии хотя бы одного оператора уничтожения это следует из соотношения (4.20). Если имеются только операторы рождения, то (VI.16) также справедливо, так как

$$\langle 0|a_k^{\dagger} = \overline{a_k}|0\rangle = 0 \quad \text{и т. д.}$$

Необходимо ввести понятие *спаривания*, или *свертки*, двух операторов

$$\overline{AB} = T\{AB\} - N\{AB\}. \quad (\text{VI.17})$$

Это есть разность между T -упорядоченным и нормальным произведениями. Например, для $t_2 > t_1$ имеем

$$\begin{aligned} \overline{\hat{a}_k(t_2)\hat{a}_l^{\dagger}(t_1)} &= \hat{a}_k(t_2)\hat{a}_l^{\dagger}(t_1) - (-1)\hat{a}_l^{\dagger}(t_1)\hat{a}_k(t_2) = \\ &= (a_k a_l^{\dagger} + a_l^{\dagger} a_k) e^{-i(\epsilon_k t_2 - \epsilon_l t_1)} = \\ &= \delta_{kl} e^{-i\epsilon_k(t_2 - t_1)}, \end{aligned} \quad (\text{VI.18})$$

Таким же образом, используя соотношение (9.4), находим

$$\begin{aligned} \overline{\hat{a}_k(t_2) \hat{a}_l^\dagger(t_1)} &= 0 \quad \text{для } t_2 \leq t_1, \\ \overline{\hat{b}_k(t_2) \hat{b}_l^\dagger(t_1)} &= \delta_{k,l} e^{+\imath \epsilon_k(t_2-t_1)} \quad \text{для } t_2 \geq t_1, \\ \overline{\hat{b}_k(t_2) \hat{b}_l^\dagger(t_1)} &= 0 \quad \text{для } t_2 < t_1, \\ \overline{\hat{a}_k(t_2) \hat{a}_l(t_1)} &= \overline{\hat{b}_k(t_2) \hat{b}_l(t_1)} = \overline{\hat{a}_k(t_2) \hat{b}_l^\dagger(t_1)} = \text{и т.д.} = 0. \end{aligned} \tag{VI.19}$$

Ясно, что свертка есть уже просто число, а не оператор. Поэтому, взяв матричный элемент от обеих сторон равенства (VI.17) и воспользовавшись соотношением (VI.16), получим выражение

$$\overline{AB} = \langle 0 | T \{ AB \} | 0 \rangle, \tag{VI.20}$$

представляющее собой сокращенную форму записи формул (VI.19). Сравнивая (VI.20) с (9.1), видим, что свертка есть просто невозмущенная функция Грина, умноженная на \imath . Наконец, надо определить нормальное произведение операторов со свертками, например

$$N[\overline{ABCDEF} \overline{GHIJ}] = (-1)^p \overline{ACEFN} \overline{BDGHI}. \tag{VI.21}$$

Теорема Вика утверждает, что T -произведение операторов можно разбить на сумму нормальных произведений без сверток, с одной или более свертками и полностью свернутых операторов

$$\begin{aligned} T[UVW \dots XYZ] &= N[UVW \dots XYZ] + \\ &+ N[\overline{UVW} \dots XYZ] + N[\overline{UVW} \dots \overline{XYZ}] + \dots \\ &+ N[\overline{UVW} \dots \overline{X} \overline{YZ}] + N[\overline{UVW} \dots \overline{X} \overline{YZ}] + \dots \\ &+ \dots \\ &+ N[\overline{UVW} \dots \overline{X} \overline{YZ}] + N[\overline{UVW} \dots \overline{X} \overline{YZ}] + \dots \end{aligned} \tag{VI.22}$$

Последняя строка в (VI.22) содержит только нормальные произведения полностью свернутых операторов. Мы видим, что соотношение (VI.17) есть просто частный случай этой теоремы (общее доказательство см. в книге [64]¹⁾). Если теперь взять диагональный по ферми-вакууму матричный элемент от обеих сторон соотношения (VI.22), то нормальные произведения неполностью свернутых операторов на основании (VI.16) обратятся в нуль, и в результате получим

$$\langle 0 | T \{ UVW \dots XYZ \} | 0 \rangle = \overbrace{UVW \dots XYZ} + \overbrace{UVW \dots XYZ} + \dots =$$

= Сумма произведений всех полностью свернутых операторов (VI.23)

Соотношение (VI.23) избавляет нас от большого количества нудной работы при вычислении матричных элементов. Чтобы проиллюстрировать, как работает эта теорема, вычислим с ее помощью матричные элементы (VI.9) и (VI.9а), найденные ранее старым методом. Используя соотношения (VI.23), (VI.18) и (VI.19) для матричного элемента (VI.9) (напомним, что мы полагаем $k_1 > k_F$ и $k_2 > k_{F'}$), получаем

$$\langle 0 | T \{ \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | 0 \rangle = \overbrace{\hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1)} = \delta_{k_1, k_2} e^{-i\epsilon_{k_1}(t_2-t_1)}. \quad (\text{VI.24})$$

Для первого слагаемого в (VI.9а) при $t_2 > t > t_1$ находим

$$\begin{aligned} \langle 0 | T \{ \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_l(t) \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | 0 \rangle &= + \overbrace{\hat{a}_l(t) \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \hat{a}_{k_2}(t_2)} + \\ &+ \overbrace{\hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \hat{a}_l(t) \hat{a}_{k_2}(t_2)} + \\ &+ \overbrace{\hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_l(t) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1)} = \\ &= 0 + 0 + (-1)^2 \delta_{k_2, k} e^{-i\epsilon_{k_2}(t_2-t)} \times \\ &\quad \times \delta_{l, k_1} e^{-i\epsilon_{k_1}(t-t_1)}. \end{aligned} \quad (\text{VI.25})$$

¹⁾ См также книгу [84] — Прим ред

Второе и третье слагаемые в (VI.9a) опять-таки обращаются в нуль, а четвертое составляет

$$\begin{aligned} \langle 0 | T \{ \hat{b}_k(t) \hat{b}_i^\dagger(t) \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | 0 \rangle &= \overbrace{\hat{b}_k(t) \hat{b}_i^\dagger(t)} + \overbrace{\hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1)} + \dots = \\ &= \delta_{k, i} \delta_{k_1, k_2} e^{-i\epsilon_k(t_2-t_1)} + 0 + 0. \end{aligned} \quad (\text{VI.26})$$

Подстановка выражений (VI.25) и (VI.26) в (VI.9a) приводит к тому же результату, который мы получили раньше, т. е. к (VI.13). (В действительности этот пример, пожалуй, слишком прост — истинная мощь метода проявляется в высших порядках.)

Приложение VII

ВЫВОД ДИАГРАММНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА И ВАКУУМНОЙ АМПЛИТУДЫ

В приложениях II, IV — VI мы видели, как можно разложить функцию Грина и вакуумную амплитуду в ряд теории возмущений и как вычислять матричные элементы с помощью теоремы Вика. Осталось показать, как представить ряд теории возмущений в диаграммной форме.

Мы приведем лишь набросок процесса перевода ряда теории возмущений (V.10) на язык диаграмм в простейшем случае N невзаимодействующих фермионов во внешнем поле. Диаграммное разложение для этого случая было получено в первой части книги с помощью шуточных рассуждений и имело вид (4.34). Теперь мы должны показать, как можно представить фигурирующие в разложении матричные элементы (VI.9), (VI.9a) с помощью диаграмм. Иначе говоря, надо еще раз вывести разложение (4.34).

Метод становится совершенно прозрачным, если вспомнить, что свертка (VI.20) есть просто функция Грина, умноженная на i . Следовательно, каждая свертка в (VI.23) будет представлена на диаграммах направленной линией. Если мы добавим к этому, что каждому матричному элементу взаимодействия V_{kl} в присутствии внешнего поля нужно сопоставить точку, то способ построения диаграмм станет очевидным. Диаграммы для матричных элементов $M^{(0)}$ и $M^{(1)}$, вытекающие соответственно из формул (VI.9), (VI.24) и (VI.9a),

(VI. 25), (VI.26), имеют вид

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{array}{c} t_2 \\ | \\ k_1 \\ | \\ t_1 \end{array} & \begin{array}{c} t_2 \\ | \\ k_2 \\ \bullet \\ | \\ k_1 \\ | \\ t_1 \end{array} & \begin{array}{c} t_2 \\ | \\ k_1 \\ | \\ t_1 \end{array} \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ k \\ \bullet \\ t \end{array} \\
 M^{(0)} & \underbrace{\hspace{10em}} & M^{(1)}
 \end{array} \quad (VII. 1)$$

Первые две диаграммы в точности совпадают с диаграммами, фигурирующими в разложении (4.34) для G^+ . Однако третья диаграмма в разложении (4.34) отсутствует. Она принадлежит семейству „несвязанных“ диаграмм, и минутой позже мы покажем, как от нее избавиться. Смысл диаграмм ясен из (VII.1): каждая из них находится в однозначном соответствии с неисчезающим матричным элементом ряда теории возмущений (V. 10) для G .

[Следует заметить, что в разложении (V.10) каждая диаграмма n -го порядка входит с множителем $(-i)^n/n!$. Множитель $(-i)^n$ можно учесть, если каждой точке вместо величины V_{ki} сопоставлять $-iV_{ki}$. Что же касается $n!$ в знаменателе, то он исчезает благодаря тому, что имеется $n!$ различных способов упорядочения времен t'_1, \dots, t'_n , каждый из которых вносит одинаковый вклад после интегрирования по времени.]

Продолжая процесс вычисления [с помощью правила (VI. 23)] матричных элементов высших порядков, входящих в числитель разложения (V.10), получаем

$$\begin{array}{l}
 \text{Числитель} \\
 \text{выражения } \rightarrow \\
 \text{для } G
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 | \\
 + \bullet \\
 + | \\
 \circlearrowleft \\
 + \bullet \\
 + \text{---} \\
 + \bullet \\
 \circlearrowleft \\
 + \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \bullet \\ \circlearrowleft \end{array} \\
 + \begin{array}{c} | \\ \bullet \\ | \end{array} \\
 + \dots
 \end{array} \quad (VII.2)$$

Легко видеть, что подобно тому, как это делалось при вычислении вакуумной амплитуды (5.23) и (5.24), несвязанные диаграммы можно выделить в отдельный множитель, так что разложение (VII. 2) примет вид

$$\begin{array}{l}
 \text{Числитель} \\
 \text{выражения} = \\
 \text{для } G
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 | \\
 \times \left[1 + \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \bullet \\ \circlearrowleft \end{array} + \begin{array}{c} | \\ \bullet \\ | \end{array} + \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \bullet \\ \circlearrowleft \end{array} + \dots \right] + \\
 + \begin{array}{c} | \\ \bullet \\ | \end{array} \times \left[1 + \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \bullet \\ \circlearrowleft \end{array} + \begin{array}{c} | \\ \bullet \\ | \end{array} + \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \bullet \\ \circlearrowleft \end{array} + \dots \right] + \dots
 \end{array} \quad (VII. 3)$$

Ряд в скобках есть просто диаграммное разложение (5.20) для вакуумной амплитуды.

Обратимся теперь к знаменателю разложения (V.10). Согласно (V.13), он совпадает с разложением для вакуумной амплитуды, и мы можем написать

$$\text{Знаменатель выражения для } G = 1 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (\text{VII.4})$$

Таким образом, знаменатель в точности сокращается с рядом в квадратных скобках в числителе. Это означает, что все несвязанные диаграммы исчезают, и мы находим

$$G = \frac{\text{Числитель } G}{\text{Знаменатель } G} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \dots \quad (\text{VII.5})$$

что и доказывает правильность разложения (4.34). Полученный результат часто называют „теоремой о разложении функции Грина по связанным группам“.

Точно так же, используя теорему Вика (VI.23), можно получить из (V.10) следующее диаграммное разложение функции Грина G для системы взаимодействующих фермионов с гамильтонианом взаимодействия типа H_1 , [см. (7.48)]:

$$G = \frac{\text{Числитель } G}{\text{Знаменатель } G} = \frac{\uparrow \times [1 + \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots] + \uparrow \times \text{diagram 3} \times [1 + \text{diagram 4} + \text{diagram 5} + \dots] + \dots}{[1 + \text{diagram 6} + \text{diagram 7} + \dots]} = \text{diagram 8} + \text{diagram 9} + \text{diagram 10} + \text{diagram 11} + \text{diagram 12} + \dots \quad (\text{VII.6})$$

Этот результат подтверждает формулу (4.63).

Отметим, что диаграмма типа „пузырь“ (4.54 а) в разложении (VII.6) появилась из следующего члена первого по-

рядка в числителе G :

$$M_{\text{взаим}}^{(1)} = -i \int dt \sum_{\substack{k, m > k_F \\ l, n < k_F}} \left(-\frac{i}{2}\right) V_{klmn} \times \\ \times \langle 0 | T \{ \bar{b}_l(t) \hat{a}_k^\dagger(t) \hat{a}_m(t) \bar{b}_n^\dagger(t) \hat{a}_{k_2}(t_2) \hat{a}_{k_1}^\dagger(t_1) \} | 0 \rangle. \quad (\text{VII. 6a})$$

Ей отвечает произведение сверток \bar{b}_l с \bar{b}_n^\dagger , \hat{a}_k^\dagger с \hat{a}_{k_2} и \hat{a}_m с $\hat{a}_{k_1}^\dagger$; см. (4.54 а).

1. Замечание по поводу фермионной петли

Если мы попытаемся вычислить третью диаграмму из (VII. 1), используя словарь табл. 6, то найдем

$$\left. \begin{array}{l} t_2 \\ t \\ t_1 \end{array} \right\} k_1 \text{ } \bigcirc^k = iG_0^+(k_1, t_2 - t_1) \sum_k (-i) V_{kk} iG_0^-(k, t - t) = \\ = e^{-i\epsilon_{k_1}(t_2 - t_1)} (-i) \sum_k V_{kk} (-e^{-i\epsilon_k(t - t)}) = \\ = +i \sum_k V_{kk} e^{-i\epsilon_{k_1}(t_2 - t_1)}. \quad (\text{VII. 7})$$

Сравним это с результатом, полученным излагаемым здесь методом. Рассмотрим второе слагаемое в выражении (VI. 13), соответствующее этой диаграмме, и введем при этом множитель $-i$ перед V_{kk} , дабы учесть множитель $(-i)^1$, который вносит диаграмма 1-го порядка в разложение (V.10). Тогда

$$-iM^{(1)} = -i \sum_k V_{kk} e^{-i\epsilon_{k_1}(t_2 - t_1)}. \quad (\text{VII. 8})$$

Этот результат отличается от выражения (VII.7) множителем -1 . Такая ситуация типична, и можно показать, что для получения правильного знака необходимо приписать каждой фермионной петле множитель -1 . Поэтому диаграмма (VII. 7), содержащая одну фермионную петлю \bigcirc , получает дополнительный множитель -1 . Это правило можно вывести путем тщательного анализа числа перестановок, которые необходимо совершить при использовании соотношения (VI.23) и каждая из которых приводит к возникновению множителя -1 . Доказательство его — довольно хитрое — подробно проведено в работе [15]¹⁾.

¹⁾ См также [84] — Прим ред.

2. Замечание по поводу диаграмм, в которых нарушается принцип Паули

Уже отмечалось, что при $k_1 = k_2$ в диаграмме 4 из разложения (4.34) нарушается принцип Паули. Если взглянуть на разложение (VII.2) для числителя G , то обнаружится, что эта диаграмма в действительности взаимно уничтожается с другой, уже несвязанной. Действительно,

$$\begin{array}{c} l, \omega \\ | \\ k_1, \omega \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} k_1, \omega \\ | \\ k_1, \omega \end{array} = iG_0^+(k_1, \omega) iG_0^-(l, \omega) iG_0^+(k_1, \omega), \quad (\text{VII.9})$$

$$\begin{array}{c} | \\ k_1, \omega \end{array} \left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ k_1, \omega \end{array} \right. \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ l, \omega \end{array} = (-1) iG_0^+(k_1, \omega) iG_0^-(l, \omega) iG_0^+(k_1, \omega), \quad (\text{VII.10})$$

причем множитель -1 появился благодаря присутствию фермионной петли. Тем не менее диаграммы, нарушающие принцип запрета, приходится удерживать для того, чтобы доказать „теорему о разложении функции Грина по связанным группам“, (VII.5). [Ср. замечания после формулы (5.13) по поводу диаграмм, в которых нарушается закон сохранения импульса.]

Приложение VIII

СПЕКТРАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ

Для краткости мы выведем выражение только для функции $A^+(\mathbf{k}, \omega)$; выражение для функции $A^-(\mathbf{k}, \omega)$ получается точно таким же способом. Пусть Ψ_n^N и E_n^N — точные собственные функции и энергии гамильтониана H системы из N взаимодействующих частиц. Функцию Грина $G^+(\mathbf{k}, t)$ можно представить в виде суммы по этим точным функциям, если в выражение (9.7) для нее вставить единичный оператор (см. приложение I):

$$\sum_n |\Psi_n^{N+1}\rangle \langle \Psi_n^{N+1}|$$

и положить $t_1 = 0$, $t_2 = t$:

$$\begin{aligned}
 G^+(\mathbf{k}, t) &= -i\theta_t \sum_n \langle \Psi_0^N | e^{iHt} c_k | \Psi_n^{N+1} \rangle \langle \Psi_n^{N+1} | e^{-iHt} c_k^\dagger | \Psi_0^N \rangle = \\
 &= -i\theta_t \sum_n |\langle \Psi_n^{N+1} | c_k^\dagger | \Psi_0^N \rangle|^2 e^{-i(E_n^{N+1} - E_0^N)t} = \\
 &= -i\theta_t \sum_n |(c_k^\dagger)_{n0}|^2 e^{-i(E_n^{N+1} - E_0^N)t}. \quad (\text{VIII. 1})
 \end{aligned}$$

Фурье-преобразование последнего выражения дает

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = \sum_n |(c_k^\dagger)_{n0}|^2 \frac{1}{\omega - (E_n^{N+1} - E_0^N) + i\delta}. \quad (\text{VIII. 2})$$

Отсюда видно, что полюсы G^+ появляются при значениях ω , равных разности энергий возбужденных состояний системы из $N+1$ взаимодействующих частиц и энергии основного состояния системы из N взаимодействующих частиц. Аналогичное доказательство справедливо и в общем случае.

Появившиеся разности энергий можно выразить с помощью химического потенциала, определенного формулой (9.23), следующим образом:

$$\begin{aligned}
 E_n^{N+1} - E_0^N &= E_n^{N+1} - E_0^{N+1} + E_0^{N+1} - E_0^N = \\
 &= \underbrace{E_n^{N+1} - E_0^{N+1}}_{\omega_{n0}^{N+1}} + \underbrace{E_0^{N+1} - E_0^N}_{\mu^{N+1}} =
 \end{aligned} \quad (\text{VIII. 3})$$

Для больших N (это верно для электронного газа или ядерной материи, но не для конечных ядер!) мы имеем

$$\begin{aligned}
 \mu^{N+1} &\approx \mu^N \equiv \mu, \\
 \omega_{n0}^{N+1} &\approx \omega_{n0}^N \equiv \omega_{n0}.
 \end{aligned} \quad (\text{VIII. 4})$$

Отсюда

$$G^+(\mathbf{k}, t) = -i\theta_t \sum_n |(c_k^\dagger)_{n0}|^2 e^{-i(\omega_{n0} + \mu)t}, \quad (\text{VIII. 5})$$

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = \sum_n |(c_k^\dagger)_{n0}|^2 \frac{1}{\omega - (\omega_{n0} + \mu) + i\delta}. \quad (\text{VIII. 6})$$

Так как энергетические уровни расположены очень близко друг к другу, то от суммирования можно перейти к интегрированию, введя *спектральную функцию*

$$A^+(\mathbf{k}, \omega) d\omega = \sum_{\omega < \omega_{n0} < \omega + d\omega} |(c_k^\dagger)_{n0}|^2, \quad (\text{VIII. 7})$$

или

$$A^+(\mathbf{k}, \omega) = \sum_n |(c_k^+)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (\text{VIII. 8})^1$$

Эта функция определена только для $\omega \geq 0$, так как, согласно выражениям (VIII.3) и (VIII.4), $\omega_{n0} \geq 0$. Она определяет вероятность того, что состояние $|\Psi_0^N\rangle$ с одной добавленной частицей с импульсом \mathbf{k} есть точное собственное состояние системы из $N+1$ частиц, причем энергия его лежит в интервале между ω и $\omega + d\omega$. Подставляя (VIII.7) в (VIII.5) и (VIII.6), получаем

$$G^+(\mathbf{k}, t) = -i\theta_t \int_0^\infty A^+(\mathbf{k}, \omega) e^{-i(\omega + \mu)t} d\omega, \quad (\text{VIII. 9})$$

т. е.

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = \int_0^\infty d\omega' \frac{A^+(\mathbf{k}, \omega')}{\omega - \omega' - \mu + i\delta}, \quad (\text{VIII. 10})$$

что совпадает с выражениями (9.22) и (9.24).

Приложение IX

КАК ИСПОЛЬЗОВАТЬ ДОБАВКУ $i\delta$

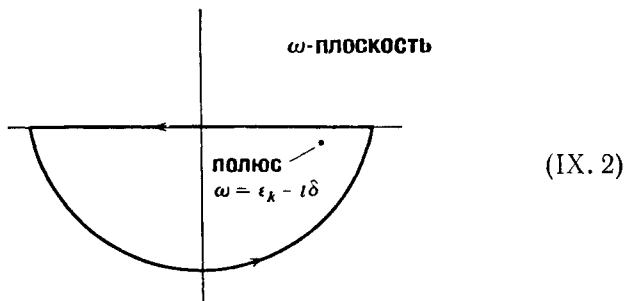
Простейшим примером использования добавки $i\delta$ при работе с функцией Грина служит обратное преобразование Фурье от $G_0^+(k, \omega)$ [см. (3.13)] к $G_0^+(k, t)$ (здесь $t = t_2 - t_1$) [см. (3.10)]. Это преобразование имеет вид

$$G_0^+(k, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G_0^+(k, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \varepsilon_k + i\delta}. \quad (\text{IX. 1})$$

Подынтегральное выражение содержит полюс при $\omega = \varepsilon_k - i\delta$. Интеграл можно вычислить, если провести интегрирование

¹⁾ Вообще говоря, определение спектральной функции (VIII.8) пригодно и для систем, не обладающих квазинепрерывным спектром. — *Прим перев.*

по контуру, охватывающему этот полюс:



(IX. 2)

Согласно теореме о вычетах,

$$\begin{aligned} \int_{\text{contour}} &= \int_{+\infty}^{-\infty} + \int_{\text{arc}} = 2\pi i \sum_n \text{вычет в } n\text{-м полюсе} = \\ &= 2\pi i \lim_{\omega \rightarrow \epsilon_k - i\delta} \frac{(\omega - \epsilon_k + i\delta) e^{-i\omega t}}{2\pi(\omega - \epsilon_k + i\delta)} = i e^{-t(\epsilon_k - i\delta)t}. \end{aligned} \quad (\text{IX. 3})$$

Интеграл по большой полуокружности исчезает, так как $t > 0$, согласно определению (3.1) для G^+ , и поэтому „обрезающий“ множитель $e^{-i\omega t}$ в (IX. 1) стремится к нулю. Следовательно,

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - \epsilon_k + i\delta} = i e^{-t(\epsilon_k - i\delta)t}; \quad (\text{IX. 4})$$

опуская уже не нужную бесконечно малую добавку, получаем

$$G_0^+(k, t) = - i e^{-i\epsilon_k t}, \quad (\text{IX. 5})$$

что совпадает с результатом (3.10).

Этим методом можно воспользоваться для вычисления фурье-трансформанты $G_0(k, \omega)$; см. (8.35). Здесь $t < 0$, и потому контур должен проходить в верхней полуплоскости.

Этим методом можно вычислить и интеграл, входящий в выражение (9.38), если использовать в определении G обрезающий множитель $\text{exr}(i\omega\eta)$ (где η — положительная бесконечно малая величина, такая, что $\eta \times \infty = \infty$);

в результате имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} iG_0(k, \omega) = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega\eta}}{\omega - \varepsilon_k + i\delta_k} = \begin{cases} -1, & k < k_F, \\ 0, & k > k_F. \end{cases} \quad (\text{IX.6})$$

Мы использовали здесь контур интегрирования, замыкаемый в верхней полуплоскости.

Приложение X

ФУНКЦИЯ ГРИНА ЭЛЕКТРОНА В НОРМАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЕ



Гамильтониан системы взаимодействующих электронов и фононов определяется выражением (15.4). Для вычисления функции Грина электронов в такой системе к словарию табл. 10 следует добавить выражения для энергии электрон-фононного взаимодействия и для функции Грина невзаимодействующих фононов. Первое из них в аппроксимации „желе“ имеет вид (15.8). Второе [см. в гл. 16 выражение, следующее сразу за формулой (16.41)] есть

$$D_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\omega - \Omega_q + i\delta} - \frac{1}{\omega + \Omega_q - i\delta} = \frac{2\Omega_q}{\omega^2 - \Omega_q^2 + i\delta\Omega_q}. \quad (\text{X.1})$$

Функция Грина (X.1) очень похожа на функцию Грина электрона, но с той лишь разницей, что здесь добавлена „отрицательно частотная“ часть. [Выбор множителя в числителе выражения (X.1) есть вопрос удобства (см. [60]).] Эти величины можно представить с помощью диаграмм, как показано в табл. 15.

• *Диаграммный словарь для фононов*

Таблица 15

Диаграмма	Функция
Свободный фонон 	$iD_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i2\Omega_q}{\omega^2 - \Omega_q^2 + i\delta\Omega_q}$
Электрон-фононное взаимодействие 	$-ig_q = -i \frac{4\pi e^2}{q} \sqrt{\frac{Z^2 N}{2\Omega_p M}}$

Разложение функции Грина G имеет вид

$$(X.2)$$

Заметим, что здесь опущены все диаграммы типа „пузырь“, так как

$$\mathbf{q} = 0 \quad \text{---} \bigcirc = 0, \quad (X.3a)$$

$$\mathbf{q} = 0 \quad \text{---} \bigcirc = 0. \quad (X.3b)$$

Результат (X.3a) следует из тех же соображений, которые приведены сразу после формулы (10.32). Что же касается результата (X.3b), то здесь нужно иметь в виду, что фонон с импульсом $\mathbf{q} = 0$, т. е. с бесконечной длиной волны, отвечает трансляции всего кристалла как целого. Эта диаграмма исключается, если просто зафиксировать положение кристалла ¹⁾.

Наиболее примечательно в разложении (X.2), то, что фононные линии (и точки, отвечающие вершинам) входят в диаграммы точно таким же образом, как и линии кулоновского взаимодействия. Это означает, что мы имеем


¹⁾ Это не вполне точно. На самом деле, если речь идет об акустических фононах, рассматриваемая диаграмма обращается в нуль вследствие обращения в нуль матричного элемента электрон-фононного взаимодействия [см. выражения (X.21) и (X.23)]. Это в свою очередь есть следствие того, что при трансляции кристалла как целого энергия взаимодействия электронов с решеткой не меняется. — *Прим. перев.*

эффективное электрон-электронное взаимодействие, возникающее вследствие испускания и поглощения виртуальных фононов. Это и есть взаимодействие, на которое обратил внимание Фрелих и которое мы рассматривали в п. А § 3 гл. 15. На диаграммном языке имеем



$$(X.4a)$$

КЕЛДЫШОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

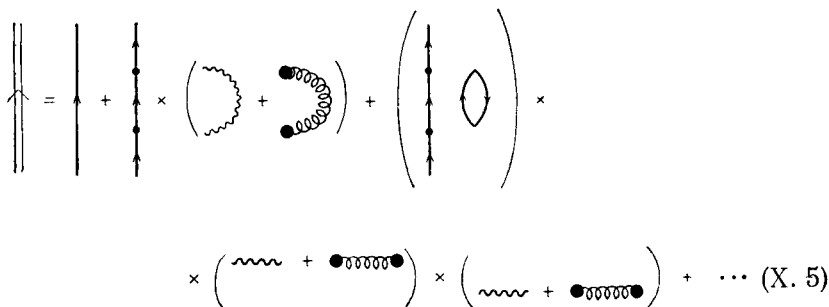


$$(X.4б)$$

ФРЕЛИХОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
(ЭЛЕКТРОН-ФОНОН-ЭЛЕКТРОН)

Обращаясь к табл. 15, мы замечаем, что взаимодействие (X.4б) зависит от частоты ω и потому оказывается запаздывающим.

Симметрия, с которой взаимодействия (X.4а) и (X.4б) входят в разложение (X.2), позволяет нам с помощью некоторой ловкости рук провести предварительное частичное суммирование; в результате ряд оказывается таким же простым, как и в случае отсутствия фононов. Перепишем сначала это разложение в факторизованной форме



$$\times \left(\text{wavy} + \text{wavy with dot} \right) \times \left(\text{wavy} + \text{wavy with dot} \right) + \dots (X.5)$$

Введем *комбинированное взаимодействие*



$$(X.6)$$

Это приводит к разложению

$$\begin{array}{c} \parallel \\ \uparrow \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \dots, \quad (\text{X. 7})$$

которое в точности совпадает с разложением (9.40), справедливым в отсутствие взаимодействия с фононами.

Так же как и в гл. 10, можно провести частичное суммирование ряда (X.7). Уравнение Дайсона для функции G имеет вид

$$\begin{array}{c} \parallel \\ \uparrow \end{array} = \frac{1}{\begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array}^{-1} - \Sigma}, \quad (\text{X. 8})$$

где неприводимая собственно-энергетическая часть есть

$$\Sigma = \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \dots \quad (\text{X. 9})$$

Здесь можно легко провести те же перенормировки, что и в выражении (10.8). Одетое комбинированное взаимодействие определяется уравнением

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} \quad (\text{X. 10})$$

где Λ соответствует сумме всех неприводимых поляризационных частей (которые нельзя разбить на две части путем удаления линии комбинированного взаимодействия)

$$\Lambda = \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{---} \\ \uparrow \end{array} + \dots \quad (\text{X. 11})$$

Это есть аналог выражений (10.54) и (10.52). Так же как это было сделано в § 1 гл. 11, можно одеть линию, соответствующую свободной функции Грина. Перенормированный ряд тогда не будет содержать уже никаких вставок в линии, отвечающие взаимодействию и функции Грина, и все взаимодействия и свободные функции Грина станут одетыми:

$$\Sigma = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots \quad (\text{X. 12})$$

Решением уравнения (X. 10) служит, очевидно,

$$\text{Diagram 1} = \frac{\text{Diagram 2}}{1 - \text{Diagram 3}} = \frac{\text{Diagram 4}}{1 - \text{Diagram 5} - \text{Diagram 6}} + \frac{\text{Diagram 7}}{1 - \text{Diagram 8} - \text{Diagram 9}} \quad (\text{X. 13})$$

Отсюда следует, что одетое комбинированное взаимодействие есть сумма экранированного кулоновского взаимодействия и экранированного взаимодействия Фрелиха. Отметим, что

если заменить Diagram 3 петлей низшего порядка из разложения (X. 11), то слагаемое в знаменателе, описывающее экранирование, будет равно просто сумме кулоновской и фоновой частей.

В литературе (см. список в конце гл. 15!) одетое комбинированное взаимодействие изображается обычно в другой форме, более сложной, но поддающейся несколько более прямой физической интерпретации. Определим:

1) одетое кулоновское взаимодействие

$$\begin{aligned}
 \text{wavy line} &= \text{wavy line} + \text{wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda + \text{wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda + \dots = \\
 &= \frac{\text{wavy line}}{1 - \text{wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda},
 \end{aligned}$$

(X. 14)

2) одетую фоновую линию

$$\begin{aligned}
 \text{double wavy line} &= \text{double wavy line} + \text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda + \text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda + \text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda + \\
 &+ \text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda + \text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda + \dots = \\
 &= \text{double wavy line} + \text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda + \text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda \text{---} \text{loop } \Lambda,
 \end{aligned}$$

ИЛИ

$$\text{double wavy line} = \frac{\text{double wavy line}}{1 - \frac{\text{double wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda}{1 - \text{wavy line} \text{---} \text{loop } \Lambda}} \quad (\text{X. 15})$$

3) одетое электрон-фононное взаимодействие

$$\begin{aligned}
 \text{Diagram} &= \text{Diagram} + \text{Diagram} + \text{Diagram} + \text{Diagram} + \dots = \frac{\text{Diagram}}{1 - \text{Diagram}}
 \end{aligned}
 \tag{X.16}$$

[Обрубки линий в соотношении (X. 16) оставлены только для того, чтобы показать, где присоединяются электронные и фононные линии. Отметим, что \odot не есть обычная одетая вершина, подобная (11.30), так как она содержит вставки только в фононную ветвь.] Тогда с помощью простой диаграммной алгебры можно показать, что

$$\text{Diagram} = \text{Diagram} + \text{Diagram}
 \tag{X.17}$$

Таким образом, одетое комбинированное взаимодействие складывается из одетого кулоновского и одетого фононного взаимодействий.

Посмотрим, чему равно взаимодействие (X. 17) в приближении случайных фаз, когда

$$\text{Diagram} = \text{Diagram}$$

Тогда одетой кулоновской линии соответствует просто эффективный потенциал $V_{\text{эфф}}$ в приближении случайных фаз, определяемый соотношением (10.35):

$$\text{Diagram}_{\text{RPA}} \equiv -iV_{\text{эфф}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-iV_q}{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)}.
 \tag{X.18}$$

Одетая фононная линия (см. литературу, указанную в конце гл. 15) определяется выражением

$$\text{Diagram}_{\text{RPA}} \equiv iD(\mathbf{q}, \omega) = \frac{i2 \sqrt{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, 0)} \omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2 + i\delta\omega_q},
 \tag{X.19}$$

где ω_q — фононная частота, перенормированная за счет возникновения электронного облака. Она определяется выражением

$$\omega_q = \frac{\Omega_q}{\sqrt{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, 0)}} = \left(\frac{4\pi Z^2 e^2 N/M}{1 + \lambda^2/q^2} \right)^{1/2} \sim q \quad (\text{при малых } q). \quad (\text{X. 20})$$

Это значительно более респектабельное поведение для продольных фононов, чем то, которое показано на фиг. 15. Заметим, что с точностью до несущественного множителя $\sqrt{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, 0)}$ выражение (X. 19) совпадает с функцией Грина свободных фононов (X. 1), в которой частоты Ω_q заменены на ω_q . Энергия одетого электрон-фононного взаимодействия задается выражением

$$\odot_{\text{RPA}} \equiv -ig_{\text{эфф}}(\mathbf{q}) = \frac{-ig_q}{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, 0)}. \quad (\text{X. 21})$$

Это есть экранированное взаимодействие, которое, очевидно, значительно меньше затравочного.

Мы можем использовать найденные результаты и записать выражение для энергии одетого комбинированного взаимодействия (X. 17) в виде

$$\begin{aligned} \overline{\text{RPA}} &\equiv \\ &\equiv -i\mathcal{V}_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = -i[|g_{\text{эфф}}(\mathbf{q})|^2 D(\mathbf{q}, \omega) + V_{\text{эфф}}(\mathbf{q}, \omega)] = \\ &= -i \left\{ \left(\frac{g_q}{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, 0)} \right)^2 \frac{2\sqrt{\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, 0)}\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2 + i\delta\omega_q} + \frac{4\pi e^2}{q^2 \epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)} \right\}. \quad (\text{X. 22}) \end{aligned}$$

Ясно, что это выражение описывает запаздывающее взаимодействие. Здесь уместно связать полученные нами результаты с выражением (15.13) для энергии электрон-фонон-электронного взаимодействия, используемого Бардином, Купером и Шриффером. Последнее выражение представляет собой просто статическую аппроксимацию формулы (X. 22), в которой диэлектрическая проницаемость $\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega)$ заменяется своим статическим пределом при $\omega \rightarrow 0$

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) \rightarrow \epsilon(\mathbf{q}) = 1 + \frac{\lambda^2}{q^2}, \quad (\text{X. 23})$$

а частота ω в функции Грина для фонона положена равной $\epsilon - \epsilon_{k-q}$. Такая замена в формуле (X. 22) приводит как раз к выражению (15.13).

Отметим, что первое слагаемое в (X.22), описывающее фрелиховское взаимодействие, отрицательно при малых ω . Таким образом, критерий сверхпроводимости при наличии комбинированного взаимодействия опять-таки сводится к тому, что фрелиховское слагаемое должно превосходить кулоновское. В случае нормальных систем, с которыми мы имеем дело в этом приложении, доминирует кулоновское слагаемое.

Вычислим теперь функцию Грина электрона, используя следующее приближение для собственно-энергетической части:

$$\Sigma \approx \frac{\mathbf{k} + \mathbf{q}}{\omega + \epsilon} \quad (X.24)$$

Здесь одетое комбинированное взаимодействие \overline{V} определяется выражением (X.22). Имеем

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = i \int \frac{d^3q d\epsilon}{(2\pi)^4} G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega + \epsilon) [|g_{\text{эфф}}(\mathbf{q})|^2 D(\mathbf{q}, \epsilon) + V_{\text{эфф}}(\mathbf{q}, \epsilon)]. \quad (X.25)$$

Вычисления проведены в книге [58]. Они приводят к закону дисперсии квазичастиц с эффективной массой, которая вблизи поверхности Ферми равна

$$m^* = m + \delta m_{\text{кулон}} + \delta m_{\text{фонон}}. \quad (X.26)$$

Здесь $\delta m_{\text{кулон}}$ определяется выражением (10.47), а

$$\delta m_{\text{фонон}} = m \frac{4}{\pi} \left(\frac{\pi^2}{18} \right)^{1/3} r_s \ln \left[\frac{(2k_F)^2 + \lambda^2}{\lambda^2} \right], \quad (X.27)$$

причем λ есть параметр экранирования в приближении случайных фаз (10.39). Этого результата и следовало ожидать: масса голого электрона перенормируется частично за счет сопровождающего его облака других электронов, частично за счет облака фононов.

Когда в комбинированном взаимодействии доминирует фрелиховское слагаемое, приведенное выше вычисление функции Грина электрона становится несправедливым, так как система переходит в сверхпроводящее состояние. В этом случае для вычисления функции Грина электрона следует использовать метод Намбу, описанный в § 6 гл. 15.

ОТВЕТЫ К УПРАЖНЕНИЯМ

Глава 1

1. Имеем

$$\begin{aligned}
 [b_q, b_{q'}^\dagger] &= b_q b_{q'}^\dagger - b_{q'}^\dagger b_q = \frac{1}{2m\hbar\sqrt{\omega_q\omega_{q'}}} [\mathcal{F}_q, \mathcal{F}_{q'}] + \\
 &+ \frac{i}{2\hbar} \sqrt{\frac{\omega_{q'}}{\omega_q}} [\mathcal{F}_{q'}, \mathcal{U}_{q'}] - \frac{i}{2\hbar} \sqrt{\frac{\omega_q}{\omega_{q'}}} [\mathcal{U}_q, \mathcal{F}_{q'}] + \\
 &+ \frac{m}{2\hbar} \sqrt{\omega_q\omega_{q'}} [\mathcal{U}_q, \mathcal{U}_{q'}],
 \end{aligned}$$

Используя формулу (1.32), немедленно получаем равенство (1.37а).

3. $b_{q_2}^\dagger \Psi_{3q_2} = \sqrt{4} \Psi_{4q_2}$.

5. а) $b_{q_1}^\dagger \Psi_{0q_1, 3q_2, 0q_3, 0, \dots} = b_{q_2}^\dagger \Psi_{0q_1, \Psi_{3q_2}, \Psi_{0q_3}, \dots} =$
 $= \Psi_{0q_1} \sqrt{4} \Psi_{4q_2} \Psi_{0q_3}, \dots = \sqrt{4} \Psi_{0q_1, 4q_2, 0q_3}, \dots$

б) $b_{q_2} \Psi_{0q_1, 0q_2, 0, 0, \dots} = 0$.

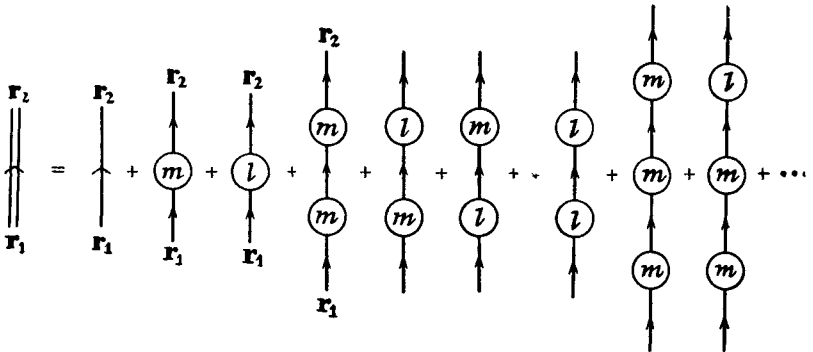
в) $b_{q_1}^\dagger b_{q_3} b_{q_1}^\dagger \Psi_{1q_1, 5q_2, 0q_3, 0, 0, \dots} = \sqrt{3} \sqrt{5} \sqrt{2} \Psi_{3q_1, 4q_2, 0q_3, 0, 0, \dots}$

6. Пять фононов.

7. $E = \frac{1}{2} \sum_q \hbar\omega_q + 2\hbar\omega_{q_3} + 3\hbar\omega_{q_5}$.

Глава 2

1.



В n -м порядке 2^n диаграмм.

2. $P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) + P_0(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_1) P(m) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_m) +$
 $+ P_0(\mathbf{r}_l, \mathbf{r}_1) P(l) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_l) + P_0(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_1) P(m) P_0(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_m) P(m) P_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_m) + \dots$

$$3. P(r_2, r_1) = c + c^2 [P(m) + P(l)] + c^3 [P(m)^2 + P(m)P(l) + P(l)P(m) + P(l)^2] + c^4 \dots = c \{1 + c [P(m) + P(l)] + c^2 [P(m) + P(l)]^2 + \dots\} = \frac{c}{1 - c [P(m) + P(l)]}.$$

$$4. P(r_2, r_1) = \frac{c}{1 - c \sum_a P(a)}.$$

Глава 3

1. В этом случае функция $U(r)$ в формуле (3.4) равна просто $\frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$ и $\epsilon_k = \left(k + \frac{1}{2}\right) \omega_0$, где $k = 0, 1, 2, \dots$. Функция Грина соответствует отсутствию взаимодействия и равна

$$G_0^+(k, t_2 - t_1) = -i \theta_{t_2 - t_1} e^{-i \left(k + \frac{1}{2}\right) \omega_0 (t_2 - t_1)},$$

$$G_0^+(k, \omega) = \left[\omega - \left(k + \frac{1}{2}\right) \omega_0 + i\delta \right]^{-1}.$$

2. Имеем

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2, \quad H \phi_k = \left(k + \frac{1}{2}\right) \omega_0 \phi_k;$$

таким образом

$$V_{lk} = \int dx \phi_l^* B \underbrace{\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \right)^3}_{B \left(k + \frac{1}{2}\right)^3 \omega_0^3 \phi_k} \phi_k = B \left(k + \frac{1}{2}\right)^3 \omega_0^3 \delta_{kl}.$$

3. Диаграммное разложение здесь имеет тот же вид, что и (3.33), с той лишь разницей, что знак „ \approx “ заменяется на „ $=$ “ Диаграмме

(m) соответствует функция

$$-iV_{kk} = -iB \left(k + \frac{1}{2}\right)^3 \omega_0^3,$$

а направленные линии отвечают функциям Грина из упражнения 1. Таким образом,

$$G^+(k, \omega) = \left[\omega - \left(k + \frac{1}{2}\right) \omega_0 + i\delta - B \left(k + \frac{1}{2}\right)^3 \omega_0^3 \right]^{-1}.$$

$$4. \epsilon'_k = \left(k + \frac{1}{2}\right) \omega_0 + B \left(k + \frac{1}{2}\right)^3 \omega_0^3, \quad \tau_k = \infty.$$

5. См. выражение (2.23).

Глава 4

1. Импульс дырки равен $-k$.

$$2. a) c_3^+ c_6^+ c_4^+ c_6^+ c_3 |11111000 \dots\rangle = 0,$$

$$b) |1101100100 \dots\rangle = |1_3^h, 1_8^p\rangle,$$

$$в) c_k^+ c_k |11111000 \dots\rangle = |11111000 \dots\rangle \text{ при } k < k_F, \text{ и } = 0 \text{ при } k > k_F.$$

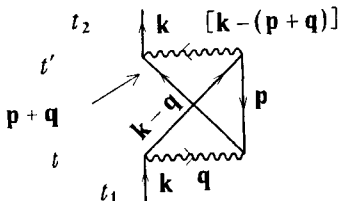
Поэтому

$$\sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k | 11111000 \dots \rangle = (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5) | 11111000 \dots \rangle.$$

3. Уравнение (4.39) с дополнительным членом $- |V_{kl}|^2 (\omega - \epsilon_2 + i\delta)^{-1}$ в знаменателе.

4. См. диаграммы u и z из (9.33) и последний абзац на стр. 184.

5. а)




б) Энергия не сохраняется:

$$\frac{k^2}{2n} + \frac{p^2}{2m} \neq \frac{(k - q)^2}{2m} + \frac{(p + q)^2}{2m},$$

6. $[iG_0^+(k, \omega)]^2 \times F(k, \omega)$, где

$$F(k, \omega) = \sum_{q, l} \int \frac{d\epsilon}{2\pi} \int \frac{d\beta}{2\pi} iG_0^+(k - q, \omega - \epsilon) \times \\ \times (-iV_q)^2 \times (-1) \times iG_0^+(l + q, \beta + \epsilon) \times iG_0^-(l, \beta).$$

Это выражение — некоторая функция k и ω .

7. В силу сохранения импульса и энергетического параметра направленной линии, соединяющая две диаграммы вида , должна иметь

индексы k, ω . Отсюда немедленно следует результат.

8. См. формулы (10.5), (4.76) и (4.77), а также выражение для функции $F(k, \omega)$ из упражнения 6.

Глава 5

$$1. \int_0^t dt_4 \int_0^t dt_3 \int_0^t dt_2 \int_0^t dt_1 \sum_{p, q} iG_0^+(p, t_3 - t_1) \times \\ \times (-i)V_{1p} \times iG_0^-(l, t_2 - t_3) \times (-i)V_{q1} \times \\ \times iG_0^+(q, t_4 - t_2) \times (-i)V_{1q} \times iG_0^-(l, t_1 - t_4) \times (-i)V_{p1}.$$

2. а) Эквивалентные.

б) Различные.

в) Различные.

3. Диаграммы точно такие же, как и в случае (5.12) и (5.13), с той разницей, что все индексы l заменяются на m , где m такое, что $\epsilon_m < \epsilon_F$, а ϵ_F — энергия Ферми.

5. В обоих случаях в одном и том же состоянии имеются частица и дырка, что невозможно.

Глава 7

1. $c_1 c_3^\dagger c_2 |111000 \dots\rangle = (-1) |0010100 \dots\rangle.$

2. $\langle \Psi | c_1^\dagger c_1 | \Psi \rangle = (A^* \langle 100 \dots | + B^* \langle 111000 \dots |) c_1^\dagger c_1 (A | 100 \dots \rangle + B | 11100 \dots \rangle) = A^2 + B^2.$

3. $c_1 c_2^\dagger | \Psi \rangle + c_2^\dagger c_1 | \Psi \rangle = -A | 0100 \dots \rangle + A | 0100 \dots \rangle = 0.$

 4. Пользуясь равенством (7.47) и значениями e_k из ответа к упражнению 1 из гл. 3, получаем

$$H_0 = \sum_k \left(k + \frac{1}{2} \right) \omega_0 c_k^\dagger c_k.$$

5. Пользуясь равенством (7.50) в совокупности с ответом к упражнению 2 из гл. 3, ямеем

$$H_2 = \sum_{kl} B \left(k + \frac{1}{2} \right)^3 \omega_0^3 \delta_{kl} c_k^\dagger c_l = \sum_k B \left(k + \frac{1}{2} \right)^3 \omega_0^3 c_k^\dagger c_k.$$

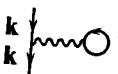
 6. Пользуясь соотношениями (7.69) (в предположении $\Omega = 1$), получаем

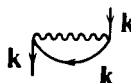
$$V_{klmn} = A \int d^3 r e^{i[(k-m)+(l-n)] \cdot r} = (2\pi)^3 A \delta(k+l, m+n).$$

Следовательно,

$$V^{ч. з.} = (2\pi)^3 A \sum_{m, n, q} c_{n-q}^\dagger c_{m+q}^\dagger c_m c_n.$$

Глава 8

1.  $= [-iG_0^-(k, \omega)]^2 (-iV_{kkkk}) (-1) (-1),$

 $= [-iG_0^-(k, \omega)]^2 (-iV_{kkkk}) (-1).$

Вторая пара диаграмм компенсируется точно так же.

3. $\varepsilon'_k = \frac{k^2}{2m} - 0,03 \frac{kk_F}{2m} \approx \frac{k^2}{2m}, \quad \varepsilon'_F \approx \frac{k_F^2}{2m},$

$$\frac{\tau_k^{-1}}{\varepsilon'_k - \varepsilon'_F} = \frac{0,25 (k - k_F)^2}{k^2 - k_F^2} = 0,25 \left(\frac{k/k_F - 1}{k/k_F + 1} \right).$$

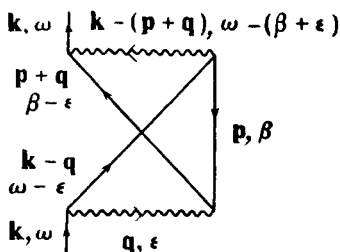
 Это отношение мало ($< 0,1$), если $k/k_F < 2$.

Глава 9

1. $T \{ c_k(t_1) c_l^\dagger(t_2) c_m^\dagger(t_3) \} = (-1) \times (-1) \times c_l^\dagger(t_2) c_m^\dagger(t_3) c_k(t_1).$

5. а и б.

6.



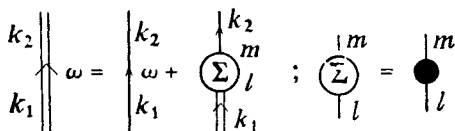
$$\equiv [iG_0(k, \omega)]^2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \times$$

$$\times \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \int \frac{d\beta}{2\pi} \times (-iV_q) (-iV_{k-p-q}) \times iG_0(k-q, \omega-\varepsilon) \times \\ \times iG_0(p, \beta) \times iG_0(p+q, \beta+\varepsilon).$$

Глава 10

1. β , ε — собственно-энергетические части, β — неприводимая, ε — приводимая.

2.



$$iG(k_2, k_1, \omega) = iG_0(k_1, \omega) \delta_{k_2 k_1} + \sum_{l, m} iG_0(k_2, \omega) \delta_{k_2 m} \times [-iV_{ml}] \times iG(lk_1, \omega).$$

3. См. (4.96).

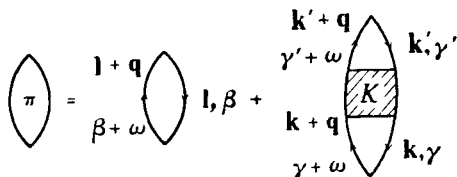
 4. Пользуясь формулой (10.21) при $V_k = A$, находим

$$K(q, \omega) = A \left[1 - A \int \frac{d^3p}{(2\pi)^4} \frac{d\varepsilon}{2\pi} G_0(p, \varepsilon) G_0(q-p, \omega-\varepsilon) \right]^{-1},$$

что можно проверить прямой подстановкой в (10.21).

5. α , ε — поляризационные части, α — неприводимая, ε — приводимая.

6.



$$-i\pi(q, \omega) = -i\pi_0(q, \omega) +$$

$$+ 4 \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \int \frac{d\gamma'}{2\pi} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\gamma}{2\pi} iG_0(k', \gamma') \times iG_0(k, \gamma) \times$$

$$\times iG_0(k+q, \gamma+\omega) \times iG_0(k'+q, \gamma'+\omega) \times (-i)K(k', \gamma', k, \gamma; q, \omega).$$

(Множитель 4 из-за спина.)

Глава 11

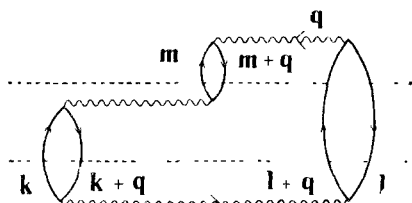
1. Диаграмму β учитывать не следует, так как она уже включена в диаграмму 4 из (11.3). Ни одну из них не следует включать в разложение (11.5), так как диаграммы a и β уже содержатся в третьей, а ν — во второй диаграмме правой части (11.5).

$$2. G(k, \omega) = (1 - A)^{-1} \left\{ \omega - \left[\mu + \frac{k_0 \cdot (k - k_0)}{m(1 - A)} \right] - i \operatorname{sgn} [k_0 \cdot (k - k_0)] \times \right. \\ \left. \times B \times (1 - A)^{-1} \times \left[\frac{k_0 \cdot (k - k_0)}{m(1 - A)} \right]^2 \right\}^{-1}.$$

Скачок на поверхности Ферми равен $(1 - A)^{-1}$.

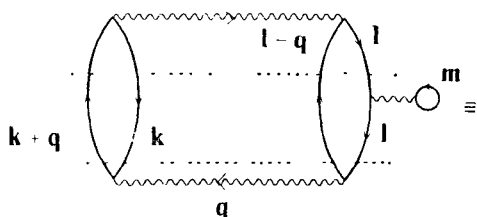
Глава 12

2.



$$\equiv \sum_{q, k, l, m} (-1)^3 (-1)^3 V_q^3 \frac{1}{(\varepsilon_{k+q} + \varepsilon_l - \varepsilon_k - \varepsilon_{l+q})} \times \frac{1}{(\varepsilon_{m+q} + \varepsilon_l - \varepsilon_m - \varepsilon_{l+q})}.$$

3. Первая диаграмма вычислена в (12.7). Вторая



$$\equiv (-1)^4 \sum_{q, k, l} \frac{V_q^2}{(\varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{l-q})} \left[\frac{(-1)^3 \sum_{m < k_F} V_{lmtm}}{(\varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{l-q})} \right].$$

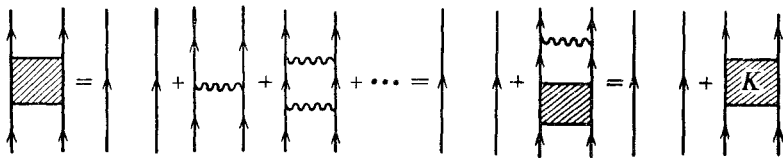
Эта диаграмма с n пузырями содержит множитель в скобках в n -й степени. Следовательно, мы имеем геометрическую прогрессию, суммирование которой дает

$$\varepsilon = (-1)^4 \sum_{qkl} \left\{ \frac{-\frac{1}{2} V_q^2}{\varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{l-q}} + \frac{V_q^2}{\varepsilon_k + (\varepsilon_l + \beta_l) - \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_{l-q}} \right\},$$

где

$$\beta_l = \sum_{m < k_F} V_{lmtm}.$$

1.



3.

$$a) \text{ (shaded blob)} = \left[\text{blob} + \text{blob} \right] / \left[1 - \text{blob} - \text{blob} \right],$$

$$b) \text{ (shaded blob)} = \text{blob} + \text{blob} \times (1 + \text{blob})^2 + \text{blob} \times \text{blob} \times (1 + \text{blob}) + \text{blob}^2 \times \text{blob} \times (1 + \text{blob})^4 + \dots$$

$$= \text{blob} + \text{blob} \times (1 + \text{blob})^2 / \left[1 - \text{blob} \times (1 + \text{blob}) \right],$$

в) Подстановка выражения для blob из упражнения 2 приводит к а.

1.

$$\bar{N} = \frac{\sum_t N_t e^{-\beta(E_t - \mu N_t)}}{\sum_t e^{-\beta(E_t - \mu N_t)}} = \left[\frac{\partial \ln Z}{\partial (\beta \mu)} \right]_{\beta}.$$

2. Согласно (14.12), $\ln Z_0 = \sum_k \ln (1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu_0)})$.

Следовательно, $\bar{N}_0 = \sum_k (e^{\beta(\epsilon_k - \mu_0)} + 1)^{-1}$.

5.

$$= (-1) [i\mathcal{S}_0(\mathbf{k}, \omega_n)]^2 \times$$

$$\times \sum_{p, q} \frac{1}{\beta^2} \sum_{m, i=-\infty}^{+\infty} i\mathcal{S}_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega_n - \varepsilon_m) \times$$

$$\times i\mathcal{S}_0(\mathbf{p}, \beta_i) \times i\mathcal{S}_0(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \beta_i + \varepsilon_m) \times (-V_q)^2.$$

Глава 15

$$1. 2 \sum_k \varepsilon_k b_k^\dagger b_k | \Psi_0 \rangle =$$

$$= 2 \sum_k \varepsilon_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} | \dots n_{k\uparrow} \dots n_{-k\downarrow} (= n_{k\uparrow}) \dots \rangle =$$

$$= 2 \sum_k \varepsilon_k n_{k\uparrow} n_{-k\downarrow} | \Psi_0 \rangle =$$

$$= 2 \sum_k \varepsilon_k n_{k\uparrow} | \Psi_0 \rangle = (\text{так как } n_{k\uparrow} = n_{-k\downarrow} = 0 \text{ или } 1)$$

$$= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k n_{k\sigma} | \Psi_0 \rangle.$$

$$2. [\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger] = u_k u_{k'} [c_{k\uparrow}, c_{k'\uparrow}^\dagger] - u_k v_{k'} [c_{k\uparrow}, c_{-k'\downarrow}] - \dots \text{ и т. д.}$$

$$= \delta_{kk'} [u_k u_{k'} + v_k v_{k'}] = \delta_{kk'}.$$

$$3. E = E_0 + E_{k_1} + 2E_{k_2}.$$

$$5. \sum_k \varepsilon_k (c_{k\uparrow}^\dagger, c_{-k\downarrow}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} =$$

$$= \sum_k \varepsilon_k (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow}) - \sum_k \varepsilon_k.$$

6.

$$\times \int \frac{d^3 k' d\omega'}{(2\pi)^4} \tau_3(-i\nu_{k,0}) \text{Sp} [\tau_3 \times i\mathbb{G}_0(\mathbf{k}', \omega')].$$

ЛИТЕРАТУРА

1. *Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е.*, Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, М., 1962.
2. *Anderson P. W.*, Concepts in Solids, New York, 1963.
3. *Veeby J. L.*, в книге Lectures on the Many-Body Problem, ed. E. R. Caianiello. Vol. 2, New York, 1964.
Electrons in Disordered Systems.
4. *Беллев С. Т.*, в книге The Many-Body Problem (Les Houches), New York — Paris, 1959.
Introduction to the Bogoliubov Canonical Transformation Method.
5. *Bjorken J. D., Drell S. D.*, Relativistic Quantum Mechanics, New York, 1964.
6. *Bjorken J. D., Drell S. D.*, Relativistic Quantum Fields, New York, 1965.
7. *Bloch C.*, в книге Lectures on the Many-Body Problem, ed. E. R. Caianiello, Vol. 1, New York, 1962.
General Perturbation Formalism for the Many-Body Problem at Non-zero Temperatures.
8. *Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В.*, Метод функций Грина в статистической механике, Физматгиз, М., 1961.
9. *Brout R., Carruthers P.*, Lectures on the Many Electron Problem, New York, 1963.
10. *Brown G. E.*, Lectures on Many-Body Problems, NORDITA, Copenhagen, 1961.
11. *Brown G. E.*, Nucl. Phys. (Proc. Int. School of Physics, Varenna — course 23), New York, 1963.
Collective Motion and the Application of Many-Body Techniques.
12. *Daniel E., Vosko S. H.*, Phys. Rev., **120**, 2041 (1960).
Momentum Distribution of an Interacting Electron Gas.
13. *Dicke R., Wittke J.*, Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Reading, 1960.
14. *Dirac P. A. M.*, The Principles of Quantum Mechanics, 3rd Ed., 4th Ed., Oxford, 1947, 1958. (Имеется перевод: *Дирак П. А. М.*, Принципы квантовой механики, М., 1960.)
15. *Easley B. R.*, Lectures on the Many-Body Problem and its Relation to Nuclear Physics, University of Pittsburg, 1963.
16. *Falikov L., Heine V.*, Adv. Phys., **10**, 57 (1961).
The Many-Body Theory of Electrons in Metals or Has a Metal Really Got a Fermi Surface?
17. *Falkoff D.*, в книге The Many-Body Problem (Bergen School Lectures), Ed. C. Fronsdal, New York, 1962.
The N-body Problem.
18. *Feynmann R. P.*, Quantum Electrodynamics, New York, 1962. (Имеется перевод: *Фейнман Р.*, Квантовая электродинамика, изд-во «Мир», 1964.)
19. *Feynman R. P., Hibbs A. R.*, Quantum Mechanics and Path Integrals, New York, 1965. (Имеется перевод: *Фейнман Р., Хибс А.*, Квантовая механика и интегралы по траекториям, изд-во «Мир», 1968.)

20. *Fröhlich H.*, Proc Roy. Soc., **A215**, 291 (1952).
Interaction of Electrons with Lattice Vibrations.
21. *Галицкий В. М.*, Physica (Suppl.), **26**, 174 (1960); in Report of The International Congress on Many-particle physics (June 1960).
Collective Excitations in Fermi Systems.
22. *Галицкий В. М., Мигдал А. Б.*, ЖЭТФ, **34**, 139 (1958).
23. *Geldart D. J. W., Houghton A., Vosko S. H.*, Canad. Journ. Phys., **42**, 1938 (1964).
Exchange Corrections and the Convergence of the Perturbation Expansion for the Momentum Distribution Function for an Interacting Electron Gas at Metallic Densities.
24. *Gell-Mann M., Brueckner K. A.*, Phys. Rev., **106**, 364 (1957). (Имеется перевод в сб. «Проблемы современной физики», № 1, ИЛ, 1958.)
25. *Hatano A., Kanazawa H., Mizuno Y.*, Progr. Theor. Phys., **34**, 875 (1965).
Electron Interaction and Positron Annihilation in Electron Gases.
26. *Hedin L.*, Phys. Rev., **139**, A796 (1965)
New Method for Calculating the One-Particle Greens Function with Application to the Electron Gas Problem.
27. *Heisenberg W.*, Ann. Phys., **10**, 888 (1931).
28. *Højgaard Jensen H.*, в книге Phonons and Phonon Interactions (Arhus Lectures, 1963), New York, 1964.
The Free Phonon Field.
29. *Hugenholtz N. M.*, Rep. Progr Phys., **28**, 201 (1965). (Имеется перевод: Гугенгольц Н., Квантовая теория систем многих тел, изд-во «Мир», 1967.)
Quantum Theory of Many-Body Systems.
30. *Johansson B.*, Physica, **32**, 2164 (1966).
Symmetry-breaking Average and Field Theoretic Method in Superconductivity.
31. *Kadanoff L., Baym G.*, Quantum Statistical Mechanics, New York, 1962. (Имеется перевод: Каданов Л., Бейм Г., Квантовая статистическая механика, изд-во «Мир», 1964)
32. *Kaempffer F. A.*, Concepts in Quantum Mechanics, New York, 1965. (Имеется перевод: Кемпфер Ф., Основные положения квантовой механики, изд-во «Мир», 1969)
33. *Katz A.*, в книге Lecture Notes on the Many-Body Problem (Bergen School), New York, 1962.
The Analytic Structure of Many-Body Perturbation Theory.
34. *Kittel C.*, Quantum Theory of Solids, New York, 1963. (Имеется перевод: Киттель Ч., Квантовая теория твердых тел, изд-во «Наука», М., 1967)
35. *Klein A.*, в книге Lectures on the Many-Body Problem, Ed. E. R. Caianiello, Vol. 1, New York, 1962.
Theory of Normal Fermion Systems.
36. *Kumar K.*, Perturbation Theory and the Nuclear Many-Body Problem, Amsterdam, 1962. (Имеется перевод: Кумар К., Теория возмущений и проблема многих тел для атомного ядра, изд-во «Мир», 1964.)
37. *Kurki-Suonio K.*, Phys Lett., **14**, 298 (1965).
A Note on the Partial Summation of Graphs in Many-Body Theory.
38. *Ландау Л., Лифшиц Е.*, Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963.
39. *Luttinger J. M.*, Phys. Rev., **119**, 1153 (1960)
Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a System of Interacting Fermions.

- 40 *Luttinger J. M., Ward J. C.*, Phys. Rev., **118**, 1417 (1960).
Ground State Energy of a Many-Fermion System II.
- 41 *Luttinger J. M.*, в книге The Fermi Surface, eds. W. Harrison and M. B. Webb, New York, 1960.
Theory of the Fermi Surface.
- 42 *Luttinger J. M.*, Phys. Rev., **121**, 942 (1961).
Analytic Properties of Single Particle Propagators for Many-Fermion Systems.
- 43 *Lynton E. A.*, Superconductivity, London, New York, 1962. (Имеется перевод: *Линтон Э.*, Сверхпроводимость, изд-во «Мир», 1964.)
- 44 *Mattuck R. D.*, Phys. Lett., **11**, 29 (1964).
Lifetime of Quasi Particles in Fermi System
- 45 *Mattuck R. D., Johansson B.*, Adv. Phys., **17**, 509 (1968).
Quantum Field Theory of Phase Transitions in Fermi Systems.
- 46 *Messiah A.*, Quantum Mechanics, Vol. 1, 2, Amsterdam, 1961.
- 47 *Мигдал А. Б.*, ЖЭТФ, **34**, 1438 (1958).
- 48 *Nozières P.*, Theory of Interacting Fermi Systems, New York, 1964.
- 49 *Park D.*, Introduction to the Quantum Theory, New York, 1964.
- 50 *Parry W., Turner R.*, Rep. Progr. Phys., **27**, 23 (1964).
Green Functions in Statistical Mechanics.
- 51 *Patterson J. D.*, Amer. Journ. Phys., **32**, 269 (1964).
Modern Study of Solids.
- 52 *Pines D.*, The Many-Body Problem, New York, 1961. (Имеется перевод: *Пайнс Д.*, Проблема многих тел, ИЛ, 1963.)
- 53 *Pines D.*, Elementary Excitations in Solids, New York, 1963. (Имеется перевод: *Пайнс Д.*, Элементарные возбуждения в твердых телах, изд-во «Мир», 1965.)
- 54 *Platzman P. M., Tzoar N.*, Phys. Rev., **139**, A410 (1965).
X-Ray Scattering From an Electron Gas.
- 55 *Raimis S.*, The Wave Mechanics of Electrons in Metals, North-Holland, Amsterdam, 1961.
- 56 *Rikayzen G.*, Theory of Superconductivity, New York — London, 1965.
- 57 *Schrieffer J. R.*, в книге The Many-Body Problem (Les Houches), New York — Paris, 1959.
Theory of Superconductivity.
- 58 *Schrieffer J. R.*, Theory of Superconductivity, New York, 1964.
- 59 *Schrieffer J. R.*, в книге Phonons and Phonon Interactions, Ed. Thor Bak, New York, 1964.
Electron-Phonon Interaction and Superconductivity.
- 60 *Schultz T. D.*, Quantum Field Theory and the Many-Body Problem, New York, 1964.
- 61 *Schweber S. S.*, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Illinois, 1961. (Имеется перевод: *Швэбер С.*, Введение в релятивистскую квантовую теорию поля, ИЛ, 1963.)
- 62 *Ter Haar D.*, Cont. Phys., **1**, 112 (1959—1960).
Some Recent Developments in the Many-Body Problem.
- 63 *Ter Haar D.*, в книге Fluctuation, Relaxation and Resonance in Magnetic Systems, Edinburgh, 1962.
On the Use of Green's Functions in Statistical Mechanics.
- 64 *Thouless D. J.*, The Quantum Mechanics of Many-Body Systems, New York, 1961. (Имеется перевод: *Таулес Д.*, Квантовая механика систем многих частиц, ИЛ, 1963.)
- 65 *Thouless D. J.*, Rep. Progr. Phys., **27**, 53 (1964).
Green Functions in Low Energy Nuclear Physics
- 66 *Tinkham M.*, в книге Low Temperature Physics, New York, 1962.
Superconductivity.

67. *Van Hove L., Hugenholtz N., Howland L.*, Quantum Theory of Many Particle Systems, New York, 1961.
68. *Ziman J. M.*, Electrons and Phonons, Oxford, 1962. (Имеется перевод: *Займан Дж.*, Электроны и фононы, ИЛ, 1962.)
69. *Киржниц Д. А.*, Полевые методы теории многих частиц, Гостехиздат, М., 1963.
70. *March N. H., Joung W. H., Sampanthar S.*, The Many-Body Problem in Quantum Mechanics, Cambridge, 1967.
71. *Ambegaokar V.*, в книге Astrophysics and the Many-Body Problem, 1962 Brandeis Lectures, Vol. 2, New York, 1963.
Green's Functions in Many-Body Problems.
- 72*. *Лифшиц И. М., Каганов М. И.*, Усп. физ. наук, 419 (1959); 78, 411 (1962); 87, 989 (1965).
- 73*. *Зисман Г. А.*, ЖЭТФ, 10, 1163 (1940); 11, 631 (1941).
- 74*. *Галицкий В. М.*, ЖЭТФ, 34, 151 (1958).
- 75*. *Мигдал А. Б.*, ЖЭТФ, 32, 399 (1957).
- 76*. *Sawada K.*, Phys. Rev., 106, 372 (1957). (Имеется перевод в сб. «Проблемы современной физики», № 1, 47, 1958.)
- 77*. *Nozieres P., Pines D.*, Phys. Rev., 111, 442 (1958).
- 78*. *Мигдал А. Б.*, Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, М., 1965.
- 79*. *Галицкий В. М.*, Одночастичный спектр неидеального ферми-газа, в сб. «Применение методов квантовой теории поля к задачам многих тел», под ред. А. И. Алексеева, Гостехиздат, М., 1963.
- 80*. *Шенберг Р.*, Сверхпроводимость, ИЛ, 1955.
- 81*. *Займан Дж.*, Принципы теории твердого тела, изд-во «Мир», 1968.
- 82*. *Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н., Церковников Ю. А.*, ДАН СССР, 117, 778 (1957).
- 83*. *Бонч-Бруевич В. Л.*, ЖЭТФ, 31, 522 (1956).
- 84*. *Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б.*, Квантовая электродинамика, Физматгиз, М., 1952.
- 85*. *Алексеев А. И.*, УФН, 73, 41 (1961).
- 86*. *Фрадкин Е. С.*, ЖЭТФ, 36, 1286 (1959).
- 87*. *Зубарев Д. Н.*, УФН, 71, 71 (1960).
- 88*. *Тябликов С. В., Бонч-Бруевич В. Л.*, Теория возмущений для двухвременных температурных функций Грина, М., 1962.
- 89*. *Боголюбов Н. Н.*, ЖЭТФ, 34, 58 (1958).

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода	5
Предисловие автора к русскому изданию	7
Из предисловия автора	9
Глава 1. Диаграммы Фейнмана и задача многих тел	13
§ 1. Что такое задача многих тел и для чего нужны фейнмановские диаграммы	13
§ 2. Метод канонических преобразований	18
§ 3. Элементарные возбуждения	26
§ 4. Метод квантовой теории поля	31
§ 5. Диаграммы Фейнмана и теория возмущения бесконечного порядка	33
Упражнения	36
Глава 2. Классические квазичастицы и функция Грина детского бильярда	37
§ 1. Физическая картина квазичастиц	37
§ 2. Функция Грина классической квазичастицы	40
§ 3. Вычисление функции Грина с помощью диаграмм	42
Упражнения	51
Глава 3. Квантовые квазичастицы и квантовая функция Грина детского бильярда	52
§ 1. Квантовомеханическая функция Грина	52
§ 2. Квантовый детский бильярд	57
§ 3. Исчезновение неприятных расходимостей	66
§ 4. Откуда на самом деле берется диаграммное разложение функции Грина?!	67
Упражнения	69
Глава 4. Квазичастицы в ферми-системах	70
§ 1. Метод функций Грина в системах многих тел	70
§ 2. Система невзаимодействующих ферми-частиц во внешнем поле: частицы и дырки	71
§ 3. Букварь формализма чисел заполнения (вторичного квантования)	74
§ 4. Функция Грина для системы невзаимодействующих ферми-частиц во внешнем возмущающем поле	79
§ 5. Система взаимодействующих ферми-частиц	86

§ 6. «Квазифизическая» природа диаграмм Фейнмана	97
§ 7. Квазичастицы в приближениях Хартри и Хартри — Фока	99
§ 8. Квазичастицы Хартри — Фока в ядерной материи	102
§ 9. Квазичастицы в электронном газе и приближение случайных фаз	105
Упражнения	110
Глава 5. Энергия основного состояния и вакуумная амплитуда	112
§ 1. Смысл вакуумной амплитуды	112
§ 2. Вакуумная амплитуда детского бильярда	114
§ 3. Квантовая вакуумная амплитуда для системы, состоящей из одной частицы	117
§ 4. Теорема о связанных группах для системы, состоящей из одной частицы	122
§ 5. Вычисление энергии основного состояния для системы, состоящей из одной частицы	125
§ 6. Система многих тел	129
Упражнения	132
Глава 6. Диаграммные методы в задаче многих тел с высоты птичьего полета	133
Глава 7. Формализм чисел заполнения (вторичное квантование)	138
§ 1. Преимущество формализма чисел заполнения	138
§ 2. Волновая функция системы многих частиц в формализме чисел заполнения	139
§ 3. Операторы в формализме чисел заполнения	144
§ 4. Гамильтониан и уравнение Шредингера в формализме чисел заполнения	149
§ 5. Дырочно-частичный формализм	153
§ 6. Формализм чисел заполнения и собственные функции одночастичного оператора координаты	155
§ 7. Бозоны	157
Упражнения	159
Глава 8. Границы применимости квазичастичного описания	160
§ 1. Когда квазичастичный подход терпит неудачу	160
§ 2. Система ферми-частиц, допускающая точное решение: чисто хартриевская модель	162
§ 3. Почему число квазичастиц должно быть малым	166
§ 4. Грубый расчет времени жизни квазичастицы	168
§ 5. Общая форма записи функции Грина для квазичастицы	170
Упражнения	173
Глава 9. Опять об одночастичной функции Грина	174
§ 1. Вторичное квантование и функция Грина	174
§ 2. Математическое выражение для одночастичной функции Грина	174
§ 3. Спектральная функция	178
§ 4. Вывод разложения для функции Грина в задаче многих тел	181
§ 5. Топология диаграмм	181

§ 6. Правила построения диаграмм для одночастичной функции Грина	187
§ 7. Модифицированный формализм функций Грина, в котором используется химический потенциал μ	190
Упражнения	193
Глава 10. Уравнение Дайсона, перенормировка, приближение случайных фаз и лестничное приближение	194
§ 1. Общие методы частичного суммирования диаграмм	194
§ 2. Уравнение Дайсона	196
§ 3. Квазичастицы в ферми-системе низкой плотности (лестничное приближение)	201
§ 4. Квазичастицы в электронном газе высокой плотности (приближение случайных фаз)	204
§ 5. «Одетый», или «эффективный», потенциал взаимодействия в общем случае	211
Упражнения	216
Глава 11. Самосогласованная теория возмущений и существование поверхности Ферми	217
§ 1. Одетые линии частиц и дырок или «одевание скелетов»	217
§ 2. Существование квазичастиц в случае применимости теории возмущений	220
§ 3. Существование поверхности Ферми в системе с взаимодействием	224
§ 4. Одетые вершины	226
Упражнения	228
Глава 12. Энергия основного состояния электронного газа и ядерной материи	229
§ 1. Обзор	229
§ 2. Диаграммы для энергии основного состояния	230
§ 3. Энергия основного состояния электронного газа высокой плотности. Теория Гелл-Манна и Бракнера	233
§ 4. Беглый взгляд на теорию ядерной материи Бракнера	239
Упражнения	244
Глава 13. Коллективные возбуждения и двухчастичная функция Грина	245
§ 1. Введение	245
§ 2. Двухчастичная функция Грина	246
§ 3. Поляризационная функция Грина (функция Грина для флуктуаций плотности)	249
§ 4. Функция Грина для коллективных возбуждений	251
§ 5. Плазмоны и квазиплазмоны	253
Упражнения	256
Глава 14. Ферми-системы при конечных температурах	257
§ 1. Обобщение случая $T = 0$	257
§ 2. Статистическая механика в представлении вторичного квантования	258
§ 3. Функция Грина при конечных температурах	261
§ 4. Вакуумная амплитуда при конечной температуре	266
Упражнения	270

Глава 15. Диаграммный метод в теории сверхпроводимости . . .	271
§ 1. Введение	271
§ 2. Гамильтониан системы взаимодействующих электронов и фононов	272
§ 3. Краткий обзор теории БКШ	275
§ 4. Неприменимость теории возмущения к задаче о сверхпроводнике	283
§ 5. Краткий обзор формализма Намбу	286
§ 6. Рассмотрение эффектов запаздывания в формализме Намбу	291
Упражнения	292
Глава 16. Фононы с многочастичной точки зрения	293
§ 1. Введение	294
§ 2. Гамильтониан связанных эйштейновских фононов	295
§ 3. Определение функции Грина эйштейновского фонона	298
§ 4. Вычисление функции Грина путем точного суммирования диаграмм	300
§ 5. Проблема сходимости	303
§ 6. Энергия основного состояния	305
ПРИЛОЖЕНИЯ	
Приложение I. Формализм Дирака	309
Приложение II. Оператор времений эволюции $U(t)$	316
Приложение III. Определение энергии основного состояния с помощью вакуумной амплитуды	319
Приложение IV. Оператор $\tilde{U}(t)$ и его разложение	321
1. Нулевая температура	321
2. Конечные температур	323
Приложение V. Разложения для одночастичной функции Грина и вакуумной амплитуды	324
1. Разложение для функции Грина при $T = 0$	324
2. Разложение для вакуумной амплитуды при $T = 0$	327
3. Разложение в случае конечных температур	327
Приложение VI. Вычисление матричных элементов с помощью теоремы Вика	328
Приложение VII. Вывод диаграммного разложения для функции Грина и вакуумной амплитуды	334
1. Замечание по поводу фермионной петли	337
2. Замечание по поводу диаграмм, в которых нарушается принцип Паули	338
Приложение VIII. Спектральная функция	338
Приложение IX. Как использовать добавку $i\delta$	340
Приложение X. Функция Грина электрона в нормальной электрон-фононной системе	342
Ответы к упражнениям	351
Литература	359

Р. Маттук
ФЕЙНМАНОВСКИЕ ДИАГРАММЫ
В ПРОБЛЕМЕ МНОГИХ ТЕЛ

Редактор *Е. И. МАЙКОВА*
Художник *А. В. Шипов*
Художественный редактор
Е. И. Подмарькова
Технический редактор *М. П. Грибова*

Сдано в производство 14/VII 1969 г.
Подписано к печати 27/XI 1969 г.
Бумага № 1 60×90¹/₁₆=11,5 бум. л.
23 печ. л.

Уч.-изд. л. 19. Изд. № 2/5030.

Цена 1 р. 55 к. Зак. 238.

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.