

Теоретическая
Физика

Д. Пайнс

**Проблема
многих тел**

Т
еоретическая
Ф
изика

Д. Хайнс

**Проблема
многих тел**

THE MANY-BODY PROBLEM

A Lecture Note

DAVID PINES

University of Illinois

W. A. Benjamin, Inc.

NEW YORK 1961

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Д. Пайнс

**ПРОБЛЕМА
МНОГИХ ТЕЛ**

Перевод с английского

И. Б. АЛЕКСАНДРОВА И Б. И. САДОВНИКОВА

Под редакцией

И А КВАСНИКОВА

ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНОСТРАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

Москва 1963

АННОТАЦИЯ

Настоящая книга, написанная известным американским физиком-теоретиком Д. Пайнсом, представляет собой развернутый обзор современного состояния статистической теории систем многих частиц и применяемых в ней методов исследования, в особенности методов, связанных с исследованием уравнений движения и функций Грина. Из приложений рассмотрены неидеальные ферми- и бозе системы, причем основное внимание автор уделяет не столько деталям расчета того или иного эффекта, сколько обсуждению физической стороны вопроса, целесообразности того или иного подхода, справедливости выбранного приближения и получаемых с его помощью результатов и т. д.

Книга рассчитана на физиков и математиков, интересующихся современными методами квантовой статистической физики. Она будет особенно полезна начинающим физикам-теоретикам, аспирантам и студентам старших курсов.

Редакция литературы по физике

ПРЕДИСЛОВИЕ

Последнее десятилетие ознаменовалось значительным развитием исследований, посвященных неидеальным квантовым системам многих тел, как в отношении охвата различных приложений и частных случаев, так и в смысле разработки ряда эффективных методов расчета основных физических характеристик статистических систем. В связи с этим актуальным стал вопрос о создании предназначенных не только для молодых физиков-теоретиков, но и уже имеющих опыт специалистов монографий, призванных помочь ориентироваться им во всем многообразии уже исследованных вопросов, и вместе с тем систематизировать достигнутые успехи статистической теории и выявить ограниченность тех или иных ее методов и приближений.

Предлагаемая советским читателям книга, представляющая собой авторскую переработку лекций, прочитанных известным американским теоретиком, автором многочисленных оригинальных исследований в области статистической теории, Дэвидом Пайнсом в ряде научных центров США в течение 1960—1961 гг. и в Летной школе в Лезуш (Франция), является как раз попыткой с единых позиций рассмотреть и оценить сложившуюся к настоящему времени ситуацию в проблеме многих тел. В своих лекциях Д. Пайнс уделяет основное внимание не столько деталям рас-

чета того или иного эффекта, часто отсылая читателя к оригинальному исследованию, сколько обсуждению физической стороны вопроса, начиная с самой постановки данной конкретной задачи, целесообразности выбираемого подхода и выяснению физического смысла полученного результата. Из приложений автор останавливается на наиболее существенных вопросах теории неидеального ферми-газа с прямым взаимодействием, неидеального бозе-газа, электрон-фононной системы и сверхпроводящих систем. Из методов исследования явное предпочтение оказано подходу, связанному с использованием функций Грина и диаграммного формализма. Лекции снабжены обширной библиографией работ по различным вопросам проблемы многих тел, в том числе и работ советских авторов на эту тему.

При переводе были устранены замеченные опечатки и некоторые неточности оригинала.

Перевод гл. 1—3 выполнен И. Б. Александровым, перевод дополнения — Б. И. Садовниковым.

акад. *Н. Н. Боголюбов*

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА

Настоящее издание представляет собой переработанные лекции, прочитанные за последние два года в Стенфордском университете (январь 1960), в лаборатории компании по производству счетных машин IBM (апрель 1960), в Главном атомном управлении компании Дженерал Дайнамикс (июль—август 1960), в университете штата Иллинойс (сентябрь 1960; январь 1961), в Летной школе итальянского физического общества по изучению проблем жидкого гелия (июль 1961).

В конце данной работы приведен список литературы, рекомендуемой для самостоятельного изучения, поэтому в настоящем издании лекций выпущены те разделы, с которыми лучше познакомиться в их оригинальном изложении.

Я хотел бы поблагодарить Анджело Бардазиса, Дэниеля Хоуна и Сэта Сильверстейна за сделанные ими замечания по поводу моих лекций в Иллинойском университете. За финансирование работы по подготовке издания настоящего варианта лекций выражаю благодарность Исследовательскому управлению штата Северная Каролина (Дюрхем) вооруженных сил США.

Дэвид Пайнс

Урбана, Иллинойс
Август 1961 г.

ОБЗОР ОСНОВНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема многих тел — это проблема решения вопроса: каким образом включение взаимодействия между частицами в системе конечной плотности изменяет поведение изолированных невзаимодействующих частиц. Представляют интерес для рассмотрения следующие свойства системы:

1. Энергия основного состояния.
2. Спектры элементарных возбуждений.

Вообще говоря, существуют два типа низших возбужденных состояний системы многих тел: квазичастицы, представляющие собой модификацию одночастичных возбуждений, и возбуждения коллективного типа, возникающие вследствие корреляции движений частиц из-за взаимодействия между ними.

3. Свойства систем, зависящие от температуры: удельная теплоемкость, фазовые переходы, $P - V$ -диаграммы и т. д. — для состояний равновесия; необратимые процессы, такие, как проводимость, вязкость и т. д., — для неравновесных состояний.

В этом обзоре я заостряю внимание почти исключительно на вопросах, связанных с энергией основного состояния и спектрами элементарных возбуждений систем при $T = 0$, так что свойства, упомянутые в третьем пункте, если и обсуждаются, то лишь весьма кратко. Многие из этих свойств можно определить, применяя непосредственно технику, развитую для случая нулевой температуры.

Новейшее развитие проблемы многих тел, которое вывело ее из тихого закоулка теоретической физики на широкий путь исследований, состоит, по всей видимости, из следующих трех моментов.

Первым, и наиболее важным, оказалась теория сверхпроводимости Бардина, Купера, Шриффера [28]. Эта теория не только объяснила явление сверхпроводимости, но также стимулировала целый ряд интересных исследований по теории ядерной материи, He^3 и элементарных частиц.

Вторым моментом явилось развитие единого подхода к теории многих тел. Под этим я имею в виду качественное, а зачастую и количественное понимание взаимоотношения между квазичастичными и коллективными явлениями в сложных системах, а также выявление их, исходя из заданного типа взаимодействия между частицами, составляющими систему. Например, 10 лет тому назад появилась оболочечная модель ядра, в которой нуклоны рассматривались движущимися в потенциальной яме независимо друг от друга (Майер и Йенсен). Были предложены также коллективные модели, связанные с ядерными деформациями (Бор и Моттельсон) и дипольными колебаниями (Гольдхабер и Теллер), но в них отсутствовало ясное понимание того, как связаны между собой элементарные возбуждения или как можно ввести осмысленное понятие об элементарном возбуждении для системы нуклонов, взаимодействие которых носит характер сильного короткодействующего отталкивания и дальнедействующего притяжения. Первый сдвиг наступил здесь, когда Бракнер с сотрудниками, используя технику, учитывающую многократное рассеяние, показали, что сильные короткие взаимодействия можно учесть математически и что они не оказывают заметного воздействия на движение отдельной частицы, подтверждая, таким образом, представление о квазичастицах, распределенных согласно правилам оболочечной модели. Затем, и уже совсем недавно, целый ряд исследователей (Моттельсон [80], Браун и др. [79], Баренджер [77], Беляев [78] и др.), используя технику,

заимствованную из теории сверхпроводимости и теории электронного газа, показали, как возникают коллективные эффекты вследствие остаточных слабых взаимодействий между квазичастицами оболочечной модели. Таким образом, мы знаем теперь, как исходное ядерное взаимодействие приводит к понятию «газа» квазичастиц с весьма слабым остаточным взаимодействием, обуславливающим образование коллективных возбуждений.

Третьим моментом явилось развитие модельных решений для проблемы многих тел. Под моделью я подразумеваю систему многих частиц, свойства которой можно определить в соответственно выбранном приближении, пригодность которого можно оправдать для данного типа взаимодействия частиц и данной плотности системы. Например, Гугенгольц [40] и Галицкий [18] показали, что система с малой плотностью представляет собой предельный случай, когда справедлива теория Бракнера. В качестве другого примера рассмотрим электронный газ с плотностью, сравнимой с плотностью электронного газа в металлах. Несколько лет тому назад Бом и я [4, 5] развили теорию, основанную на приближении хаотических фаз; с помощью этой теории мы показали, что кулоновское взаимодействие приводит к коллективным возбуждениям, так называемым *плазонам*, и что оно весьма сильно экранируется за счет корреляций между частицами. Таким образом, стало понятно, почему взаимодействие между электронами приводит к сосуществованию как коллективных, так и индивидуальных возбуждений системы. Однако эта теория вряд ли могла претендовать на математическое изящество, поскольку коллективный подход в отличие от квазичастичного метода основывался на введении коллективных координат, т. е. на совершенно иной базе. Некоторые ученые подвергли сомнению возможность введения дополнительных координат и пригодность приближения хаотических фаз.

Последующее развитие этой проблемы связано с работами Гелл-Манна и Бракнера [6, 7], в которых показано с помощью непосредственного суммирова-

ния ряда теории возмущений, что приближение хаотических фаз пригодно в предельном случае высокой плотности; Хаббард [11], кроме того, показал, каким образом из этого ряда вытекает понятие плазмона, так же как и одночастичного возбуждения, и выявил связь этих понятий.

Решение модельных задач значительно упростилось в связи с использованием техники теории поля, развитой Фейнманом, Швингером, Дайсоном и др. для квантовой электродинамики. Эта техника позволила непосредственно просуммировать широкий класс членов в разложении данной величины согласно теории возмущений; она указала на простой способ оценки области применимости вычислений для данной модели. Более того, техника функций Грина открыла путь к строгой формулировке некоторых вопросов, представляющих фундаментальный интерес (например, понятие элементарного возбуждения). Некоторое время техника теории поля довольно широко использовалась. Применение этой техники замедлилось, по всей видимости, в связи с тем, что в первых нескольких членах ряда теории возмущений почти для всех интересующих нас величин появлялись очевидные расходимости: разумные выражения получаются только после суммирования ряда.

В этой главе я хочу подробно остановиться на важнейших физических соображениях, касающихся проблемы многих тел, и только весьма бегло упомянуть о разработанных математических методах. Затем я дам краткий обзор ряда специфических проблем с тем, чтобы показать современное состояние рассматриваемой области. В последующих главах я предполагаю обсудить более детально некоторые новые математические принципы и вычислительные методы и применить их к изучению следующих проблем: электронного газа, системы взаимодействующих бозонов и фермионов (взаимодействие которых носит характер отталкивания), электрон-фононной системы, теории сверхпроводимости,

§ 2. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В СИСТЕМАХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

Мы будем в основном касаться двух типов элементарных возбуждений систем взаимодействующих частиц. Первый тип, обусловленный одночастичными возбуждениями, мы будем называть *квазичастицами*. Второй тип, который имеет большое значение в определении реакции системы на внешнее воздействие, мы назовем *возбуждениями колебаний плотности*. Его можно представить как совокупность квазичастичных возбуждений, либо считать новым типом возбуждения — коллективным возбуждением системы, которое не имеет места в отсутствие взаимодействия между частицами.

Для невзаимодействующей системы энергия одной частицы с импульсом p и массой m определяется выражением

$$\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}.$$

Вследствие взаимодействия между частицами характер одночастичного движения значительно изменяется. При движении частица сталкивается на своем пути с другими частицами, увлекает их за собой и т. д. Мы можем говорить о такой модифицированной частице, как о квазичастице; для нее возможна другая зависимость энергии от импульса по сравнению с той, которая имеет место для свободной частицы. При достаточно низких температурах можно рассматривать систему как совокупность независимых квазичастиц и ее удельную теплоемкость можно определить из спектра квазичастичных возбуждений. Более того, как впервые показал Ландау [87], при низких температурах форма квазичастичного спектра определяет «текущие» свойства системы. Таким образом, следует различать *нормальные системы*, в которых зависимость энергии квазичастиц от импульса квадратична, и *сверхтекучие*, в которых та же зависимость либо линейна (жидкий гелий), либо имеется щель (сверхпроводники). Существование сверхтекучего состояния для

этих систем является следствием принципа относительности Галилея и законов сохранения энергии и импульса, примененных к акту элементарного возбуждения, порожденного, например, примесью в медленно движущейся системе.

Понятие квазичастицы можно довольно строго обосновать математически с помощью введения (по аналогии с квантовой теорией поля) одночастичной функции Грина, определяемой формулой

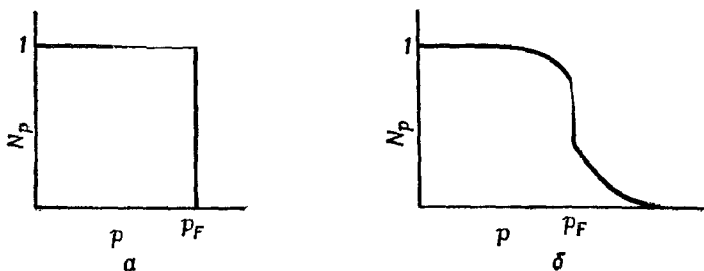
$$G(p, \tau) = -i \langle 0 | T [C_p(\tau) C_p^\dagger(0)] | 0 \rangle.$$

Здесь C_p^\dagger и C_p — вторично-квантованные операторы рождения и уничтожения фермионов в представлении Гейзенберга, T — хронологический оператор Дайсона, располагающий времена в порядке убывания слева направо, а среднее значение берется по отношению к точным волновым функциям основного состояния в гейзенберговском представлении. Функция $G(p, \tau)$ имеет следующий физический смысл: если в момент времени $t = 0$ к системе добавить одну частицу с импульсом p (волновая функция системы равна $\psi = C_p^\dagger | 0 \rangle$), то амплитуда вероятности того, что система будет находиться в этом же состоянии в более поздний момент времени τ , есть $G(p, \tau)$. Галицкий и Мигдал [3] показали, что аналитическое поведение $G(p, \epsilon)$ вблизи действительных значений ϵ [$G(p, \epsilon)$ — фурье-образ $G(p, \tau)$] определяет энергию и время жизни квазичастицы с импульсом p .

Рассмотрим спектры возбуждений квазичастиц трех систем: нормальных фермионов, сверхпроводников и бозонов. Основное состояние ферми-системы без взаимодействия частиц будет характеризоваться распределением по импульсам, имеющим вид заполненной сферы Ферми: вероятность N_p нахождения частицы в состоянии с импульсом p определяется соотношением

$$N_p = \begin{cases} 1, & p < p_F, \\ 0, & p > p_F, \end{cases}$$

показанным на фиг. 1, *а*. мы интересуемся возбужденными состояниями, лежащими над основным. Возбужденные состояния системы можно характеризовать распределением частиц (частиц с $p > p_F$, находящихся вне сферы Ферми) и дырок (частиц с $p < p_F$, отсутствующих внутри сферы Ферми). Измеренная по отношению к энергии основного состояния энергия частицы с импульсом p равна $\epsilon(p)$; энергия дырки с импульсом p' равна $-\epsilon(p')$. Для случая конечных



Фиг. 1. *а* — невзаимодействующая система фермионов; *б* — нормальная система взаимодействующих фермионов.

температур с помощью введенных представлений легко вывести обычную формулу для линейной по температуре удельной теплоемкости свободных электронов.

При наличии взаимодействия между частицами можно надеяться, что некоторые черты поведения невзаимодействующей системы сохранятся, а именно:

1. На поверхности Ферми (при $p = p_F$) функция N_p по-прежнему претерпевает разрыв, хотя характер этого разрыва может значительно изменяться, как показано на фиг. 1, *б*.

2. Низшие возбужденные состояния хорошо описываются набором независимых квазичастиц (и квазидырок); энергия $\epsilon(p)$ квазичастицы в общем случае оказывается комплексной — это соответствует тому факту, что одночастичные состояния уже нельзя определить точно. Для частицы с импульсом $p > p_F$ всегда имеется возможность в результате рассеяния на ча-

стицах, находящихся внутри поверхности Ферми, перейти в другое состояние. Таким образом, квази-частицы имеют «время жизни». Для частиц, близких к поверхности Ферми, это время жизни принимает большое значение, так как вследствие принципа Паули вероятность рассеяния (а следовательно, и мнимая часть энергии) изменяется как $(p - p_F)^2$. Кроме того, можно ожидать изменения величины линейного члена в выражении для удельной теплоемкости, соответствующего изменению эффективной массы частицы вблизи поверхности Ферми. Системы, обнаруживающие такие свойства (мы, впрочем, не имеем определенных доказательств, что таковые существуют в природе), называются *нормальными ферми-системами*.

Более корректный в математическом смысле способ описания нормальной ферми-системы заключается в возможности, например, подсчитать $G(p, \epsilon)$ при помощи последовательного применения диаграммной техники Фейнмана, в которой основными элементами ряда являются функции Грина в энергетическом представлении, $G_0(p, \epsilon)$, для невзаимодействующей ферми-системы. Другими словами, нормальные ферми-системы — это те, для которых эффективна теория возмущений. В последнее время вслед за основополагающей работой Галицкого и Мигдала [3] для таких систем было установлено много изящных теорем Коном, Латтинджером и Уордом [46, 48, 49]. Нормальная ферми-система является очень хорошим приближением для фермионов, между которыми действуют силы отталкивания (как короткодействующие, так и дальнедействующие).

Совсем иным подходом к изучению нормальных ферми-систем явилась теория ферми-жидкости Ландау [15—17]. Ландау постулирует существование квази-частиц, подчиняющихся статистике Ферми—Дирака, и затем показывает [17], как различные свойства системы можно выразить посредством относительно небольшого числа параметров. Теория Ландау — феноменологическая, так как эти параметры должны определяться из эксперимента. В некотором смысле его теория дополняет приближение теории возмущений:

она, по-видимому, наиболее эффективна для систем, применение к которым теории возмущений мало обещающе. В теории Ландау предполагается, что время жизни квазичастиц достаточно велико, чтобы можно было пренебречь разными эффектами, связанными с конечностью времени жизни, а это означает применимость данной теории лишь для очень низких температур. Недавние эксперименты Уитли и сотрудников показали, что He^3 ведет себя как ферми-жидкость при температурах ниже $0,04^\circ \text{K}$.

Квазичастицы в нормальных ферми-системах обладают непрерывным спектром возбуждений, в то время как для сверхпроводника характерно появление энергетической щели. Согласно теории Бардина, Купера, Шриффера, энергия квазичастицы имеет вид

$$E(p) = [\tilde{\epsilon}(p) + \Delta^2]^{1/2},$$

где $\tilde{\epsilon}(p)$ — энергия квазичастицы «нормальной системы», измеренная по отношению к энергии частицы на поверхности Ферми, а Δ — энергетическая щель. Более того, величина N_p не имеет разрыва на поверхности Ферми. Изменения в спектре возбуждения являются следствием эффективного притяжения между электронами в сверхпроводнике; это непосредственно приводит ко многим явлениям, которые наблюдались в состоянии сверхпроводимости (эффект Мейснера, экспоненциальная зависимость теплоемкости от температуры, бесконечное значение проводимости и т. д.). Заметим далее, что, исходя из теории Бардина, Купера, Шриффера, можно ожидать появление энергетической щели в спектре возбуждения (и сопровождающее ее сверхтекучее состояние) для любой ферми-системы, где взаимодействие имеет характер притяжения. Следовательно, весьма вероятно, что при достаточно низких температурах He^3 совершит переход из состояния ферми-жидкости (вязкость пропорциональна T^{-2}) в сверхтекучее состояние (полное отсутствие вязкости).

В системе невзаимодействующих бозонов при абсолютном нуле все частицы находятся в состоянии

с нулевым импульсом. Элементарное возбуждение с импульсом p соответствует энергии свободной частицы

$$\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m}.$$

Однако, если учесть взаимодействие между бозонами, спектр возбуждения квазичастиц резко изменится и в области малых импульсов примет, за исключением некоторых патологических случаев, вид

$$\epsilon(p) = sp.$$

Изменение спектра возбуждения является естественным следствием предположения о сохранении во взаимодействующей бозе-системе макроскопического заполнения состояний с нулевым импульсом. Поэтому функцию Грина для взаимодействующей бозе-системы можно построить на основе функций Грина для системы свободных бозонов (при условии применимости теории возмущений, т. е. для «нормальной» бозе-системы). В соответствии с измерениями теплоемкости (кубическая зависимость при низких температурах), спектр квазичастиц жидкого He^4 имеет при малых импульсах описанную форму.

§ 3. КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Спектр квазичастиц непосредственно нельзя определить с помощью измерений параметров системы многих тел. Подобные эксперименты могли бы заключаться в определении энергии и углового распределения рассеянных частиц в результате неупругих соударений при условии применимости к процессу рассеяния борновского приближения. Примерами такого рода являются рассеяние быстрых электронов и медленных нейтронов в твердых телах и рассеяние нейтронов в жидком гелии. Взаимодействие между одной из частиц, используемой для измерения, с частицами системы описывается выражением

$$\sum_l V(\mathbf{R} - \mathbf{r}_l) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}l} V_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}_l)} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} V_k \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}},$$

где $V(r)$ — эффективный потенциал взаимодействия, а V_k и ρ_k — фурье-образы потенциала и плотности соответственно, определяемые согласно соотношениям

$$V(r) = \frac{1}{\Omega} \sum_k V_k e^{ik \cdot r} = \sum_k v_k e^{ikr},$$

$$\rho(r) = \sum_l \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) = \frac{1}{\Omega} \sum_k \rho_k e^{ik \cdot r} = \frac{1}{\Omega} \sum_{ki} e^{ik \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)},$$

где Ω — объем системы.

Колебание плотности

$$\rho_k = \sum_l e^{-ik \cdot \mathbf{r}_l}$$

описывает отклонение парциальной плотности от средней величины N . В случае применимости борновского приближения вероятность того, что рассеивающаяся частица в единицу времени передает нашей системе импульс k и энергию ω , определяется формулой

$$W = (2\pi) V_k^2 \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}),$$

где ω_{n0} — точные частоты возбуждений рассматриваемой системы многих тел, индуцированные колебаниями плотности ρ_k . (Здесь и далее $\hbar = 1$.) Таким образом, максимальная информация, получаемая о системе многих тел, заключена в величине

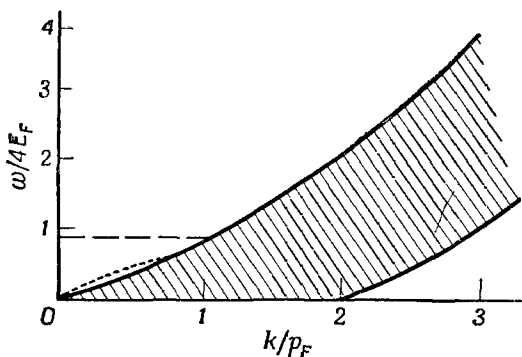
$$S(k\omega) = \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}).$$

Как впервые показал Ван Хов [55] (и как мы увидим далее), $S(k\omega)$ является фурье-образом (при преобразовании Фурье по координатам и времени) временной парной корреляционной функции для системы многих частиц. Измеренная таким образом величина определяет спектр элементарных возбуждений в случае колебаний плотности ρ_k системы. Если мы предполагаем, что в начальный момент система находится в основном состоянии, то измеренные энергии суть энергии состояний с импульсами k , соответствующие возбуждению компонент колебаний плотности ρ_k над основным состоянием системы.

Для системы невзаимодействующих частиц энергия ω имеет вид

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{k})^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m} + \frac{k^2}{2m},$$

что соответствует переходу одной частицы из состояния с импульсом \mathbf{p} в состояние с импульсом $\mathbf{p} + \mathbf{k}$. Этот процесс для системы невзаимодействующих фермионов можно рассматривать как процесс рождения



Фиг. 2. Спектр коллективных возбуждений.

Пунктирная линия соответствует плазмонам, точечная линия — нулевому звуку.

частицы с импульсом $\mathbf{p} + \mathbf{k}$ и дырки с импульсом \mathbf{p} . В силу принципа Паули имеем следующее ограничение.

$$p \leq p_F; \quad |\mathbf{p} + \mathbf{k}| \geq p_F.$$

Таким образом, возбуждение типа пары дырка — частица имеет непрерывный спектр энергии, лежащий между кривыми:

$$\omega_{\min} = \begin{cases} 0 & \text{при } k \leq 2p_F, \\ \frac{k^2}{2m} - \frac{kp_F}{m} & \text{при } k \geq 2p_F, \end{cases}$$

$$\omega_{\max} = \frac{k^2}{2m} + \frac{kp_F}{m},$$

как показано на фиг. 2.

Если учесть взаимодействие фермионов друг с другом, то спектр возбуждений колебаний плотности изменится в двух отношениях. Во-первых, спектр пары частица — дырка станет спектром пары квазичастиц (квазичастица и квазидырка). Во-вторых, появится новый вид длинноволнового возбуждения — коллективное возбуждение, спектр которого, согласно главному приближению (приближению хаотических фаз), лежит выше непрерывного спектра квазичастиц и отделен от него. Для электронного газа коллективным видом возбуждения будет плазмон (т. е. квантованное колебание плазмы), который в длинноволновом пределе имеет энергию

$$E(k) \approx \omega_p = \left(\frac{4\pi n e^2}{m} \right)^{1/2},$$

где $n = N/\Omega$ — плотность числа частиц.

Для системы фермионов, взаимодействие которых носит характер отталкивания, коллективные возбуждения называют *нулевым звуком*; при слабых взаимодействиях ветвь возбуждений нулевого звука лежит лишь чуть выше границы непрерывного спектра пар частица — дырка. Эти коллективные возбуждения могут рассматриваться как когерентные суперпозиции пар частица — дырка. В обоих случаях с уменьшением длины волны спектр коллективных возбуждений входит в область непрерывного спектра пар частица — дырка, как показано на фиг. 2.

Коллективные возбуждения напоминают звуковые волны, так как соответствуют колебаниям плотности частиц. Однако они отличаются от звуковых волн по механизму, описывающему колебания. Звуковая волна — существенно гидродинамический эффект; он наблюдается для систем, в которых локальное термодинамическое равновесие создается вследствие частых соударений между частицами. Если возникает локальное возмущение плотности, то столкновения между частицами проявляются в виде силы, заставляющей плотность измениться до своего среднего значения. Для звуковых волн, таким образом, основное значение имеют частые столкновения, и волны существуют

только при таких частотах ω , когда

$$\omega\tau \ll 1,$$

где τ — среднее время свободного пробега. С другой стороны, для коллективных возбуждений усредненное силовое поле огромного числа других частиц действует подобно силе, восстанавливающей равновесие. Столкновения между частицами стремятся нарушить это усредненное поле и, таким образом, вызвать затухание коллективных возбуждений. В результате этого коллективные возбуждения имеют место только тогда, когда их частота удовлетворяет условию

$$\omega\tau \gg 1,$$

которое может выполняться только при достаточно низких температурах. Не³ представляет собой пример системы, в которой при понижении температуры можно наблюдать переход от обыкновенного звука к нулевому звуку.

Дальнейшим условием существования коллективных возбуждений как независимых строго определенных элементарных возбуждений системы многих тел является требование, чтобы коллективные возбуждения имели большое время жизни по сравнению со временем распада этих возбуждений на пары квазичастиц, распада, энергетически возможного всегда, но маловероятного из-за когерентных эффектов, описываемых соответствующими матричными элементами. Таким образом, энергия коллективных возбуждений так же, как и энергия квазичастиц, будет, вообще говоря, комплексна.

В сверхпроводнике возбуждения типа квазичастица — квазидырка (энергии таких возбуждений образуют непрерывный спектр с минимальной энергией возбуждения 2Δ) также дают вклад в возбуждения колебаний плотности. Более того, в сверхпроводнике существуют два типа коллективных возбуждений; плазмоны, энергия которых слабо отличается от ее значения для нормального состояния, и возбуждения типа экситонов, лежащие внутри энергетической щели 2Δ в спектре возбуждений пар квазичастиц.

Для газа невзаимодействующих бозонов колебания плотности обладают единственной частотой $k^2/2m$, соответствующей переходу частицы из состояния с нулевым импульсом в состояние с импульсом k . Таким образом, энергия возбуждения колебаний плотности идентична энергии свободной частицы. Это обстоятельство в значительной мере продолжает сохраняться в системе взаимодействующих бозонов. Например, спектр энергии элементарных возбуждений, измеренный с помощью неупругого рассеяния медленных нейтронов, в пределах экспериментальной ошибки согласуется со спектром квазичастиц, который был предложен Ландау для объяснения результатов измерений удельной теплоемкости. Это совпадение показывает, что основной вклад в спектр колебаний плотности дает возбуждение квазичастиц, первоначально находившихся в конденсированном состоянии.

Коллективные возбуждения существуют также в других системах. В ферромагнетике существуют спиновые волны, которые соответствуют колебаниям плотности спина

$$S_k^z = \sum_i \sigma_i^z e^{-ik \cdot r_i}.$$

Такие же возбуждения возможны и для фермижидкости. В электронно-ионной системе, кроме высокочастотных плазменных колебаний, при которых движение электрона и иона не синфазно, существуют низкочастотные колебания, когда электроны движутся в фазе с ионами. Таковы продольные фоновые колебания в металлах. По аналогии со спектром возбуждения ионных кристаллов мы можем назвать высокочастотные колебания *оптическими плазменными колебаниями*, низкочастотные колебания — *акустическими плазменными колебаниями*. Существование как оптических, так и акустических плазмонов (частота последних пропорциональна k для больших длин волн) возможно для любой системы противоположно заряженных частиц, например электронов и дырок в полупроводниках,

§ 4 ФИЗИЧЕСКИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Я хотел бы вкратце изложить некоторые основные физические представления, с которыми приходится сталкиваться в различных аспектах проблемы многих тел. Одной из наиболее важных проблем, к изучению которой мы уже приступили, является вопрос о корреляции положений частиц, вызванной взаимодействием между ними. Такие корреляции приводят к существенным когерентным эффектам. Например, когда коллективное возбуждение, связанное с колебаниями плотности, является строго определенным элементарным возбуждением, оно обычно является преобладающим возбуждением в системе, однако, несмотря на то, что имеется только один-единственный тип коллективных возбуждений, последний сопоставляется с непрерывным спектром возбуждений квазичастиц. Причиной этому служит тот факт, что в коллективном возбуждении принимает участие большое число частиц. Корреляции, ответственные за возникновение коллективных возбуждений, одновременно приводят к когерентным явлениям, резко снижающим вероятность возбуждения пар квазичастиц, хотя это энергетически и возможно.

Такие корреляции часто носят характер экранирования, т. е. изменения эффективного взаимодействия пары частиц, вносимого остальными частицами системы. Например, данный электрон в плотном электронном газе является причиной поляризации непосредственно окружающих его частиц; он расталкивает на своем пути другие электроны до тех пор, пока образующееся при этом экранирующее облако не приобретет заряд, близкий по величине (противоположный по знаку) к заряду самого электрона. Квазичастицы (электрон плюс экранирующее облако) взаимодействуют посредством эффективных короткодействующих сил радиуса порядка среднего расстояния между частицами системы, в противоположность исходным дальнедействующим силам кулоновского взаимодействия. Плазменное колебание представляет

собой волну поляризации, связанную с упомянутым эффектом экранирования.

Другой важный случай корреляции связан с повторным рассеянием одной пары частиц друг на друге, причем в данном процессе не принимают участия никакие другие частицы среды. Эффекты многократного рассеяния подобного рода играют особо важную роль для системы как бозонов, так и фермионов в случае низкой плотности.

В сверхпроводниках существует сильная корреляция между частицами с противоположными спинами и импульсами вследствие эффективного притяжения между электронами. Такие парные корреляции приводят к ярко выраженным когерентным эффектам, например к заметному различию между поглощением электромагнитного излучения и поглощением звуковых волн в сверхпроводнике в состоянии несколько ниже температуры перехода.

Другое очень важное представление, впервые введенное Фейнманом и Коэном [84] в их теории возбуждений He^4 , — *обратный поток*. Закон сохранения продольной составляющей тока требует, чтобы в стационарном состоянии системы многих тел ток, связанный с движением возбуждений, не был бы расходящимся. Поэтому для сохранения продольной составляющей тока должен существовать встречный поток других частиц, связанный с движением возбужденной квазичастицы. Обратный поток в системе взаимодействующих частиц, соответствующий совокупности возбужденных виртуальных частиц, которые окружают данную частицу и движутся вместе с ней, вводится для того, чтобы образованная таким образом квазичастица представляла бы вполне определенное элементарное возбуждение системы. Условия сохранения продольной составляющей тока и обратного потока имеют особо важное значение в теории сверхпроводимости; только тогда, когда эти представления были надлежащим образом включены в теорию, были получены результаты, удовлетворяющие условиям градиентной инвариантности (Андерсон [32], Пайнс и Шриффер [109], Риккайзен [33]).

§ 5. МОДЕЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ И ФИЗИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

Теперь я хочу бегло обсудить несколько модельных примеров систем, рассчитанных в последнее время. В этом параграфе я попытаюсь дать убедительные черты модели, когда вклады от соответствующих ей диаграмм можно суммировать с помощью методов теории поля. Я попытаюсь также показать соответствие результатов расчетов модельных систем с рассматриваемыми физическими системами

Электронный газ высокой плотности

1. Энергию основного состояния, приходящуюся на каждый электрон, можно представить в виде разложения в ряд по степеням параметра r_s , характеризующего среднее расстояние между электронами, измеренное в единицах боровского радиуса a_0 ,

$$r_s = \left(\frac{4}{3} \pi a_0^3 n \right)^{-1/3}.$$

Это разложение имеет вид (Гелл-Манн и Бракнер [6]):

$$E_0 = \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + 0,062 \ln r_s + 0,096 + \\ + e r_s \ln r_s + f r_s + \dots$$

где коэффициенты e , f и т. д. пока еще не определены, а E_0 измеряется в ридбергах. Первый член соответствует средней кинетической энергии, приходящейся на один электрон; второй — обменной энергии, возникающей вследствие корреляций, обусловленных принципом Паули; остальные члены называют корреляционной энергией, описывающей то уменьшение энергии, которое возникает вследствие появления обусловленных кулоновским взаимодействием корреляций в движении электронов.

2. Параметр разложения r_s представляет собой отношение обменной энергии (первой поправки на взаимодействие к энергии основного состояния) к средней кинетической энергии электронов. Метод относится,

таким образом, к теории слабого взаимодействия. Разложение пригодно при $r_s < 1$ (Нозьер и Пайнс [12]).

3. Элементарными возбуждениями являются:

а. Квазичастицы, для которых зависимость энергии от импульса в непосредственной близости от сферы Ферми имеет вид (Гелл-Манн [7], Куин и Фэррелл [67], Дюбуа [60])

$$\epsilon(p) = \left(\frac{p_F^2}{2m} \right) \left\{ \frac{p^2}{p_F^2} - 0,166r_s \left[\frac{p}{p_F} (\ln r_s + 0,203) - \ln r_s + 1,80 \right] + i(0,252r_s^{1/2}) \left[\left(\frac{p}{p_F} \right) - 1 \right]^2 \right\}.$$

Следующие поправки будут более высокого порядка по r_s .

б. Плазмоны, для которых зависимость энергии от импульса при больших длинах волн дается формулой (Бом и Пайнс [4], Нозьер и Пайнс [12], Дюбуа [60]):

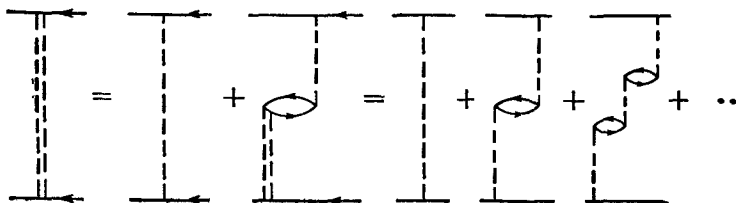
$$E(p) = \omega_p \left\{ 1 + \left(\frac{p^2}{p_F^2} \right) \left[\frac{1,3}{r_s} - \frac{3}{40} + i(4,4r_s^{1/2}) + \dots \right] \right\}.$$

Члены, содержащие поправки, будут опять более высокого порядка по r_s и будут пропорциональны p^2 .

4. Основным физическим эффектом является *поляризация* среды, т. е. экранирование эффективного взаимодействия между парой частиц в результате движения в этой среде других частиц. Это экранирование можно легко выразить с помощью зависящей от частоты продольных колебаний и волнового вектора диэлектрической проницаемости; экранирование происходит благодаря поляризационному облаку, которое сопровождает движущийся электрон.

5. Основным приближением, которое описывает электронный газ высокой плотности, является приближение хаотических фаз (*RPA*) (Бом и Пайнс [4, 5]), в котором каждый импульс передачи при взаимодействии электронов считается независимым. Например, при вычислении $S(k\omega)$ следует рассматривать только k -ю компоненту кулоновского взаимодей-

ствия; при этом необходимо просуммировать все поляризационные диаграммы низшего порядка (Хаббард [11]). Тогда частицы можно считать взаимодействующими между собой через экранированное кулоновское поле $V_k/\epsilon(k\omega)$, как это показано на диаграммах фиг. 3. Последующие члены ряда теории возмущений для величины $1/\epsilon(k\omega)$ при низких частотах возбуждения становятся все более и более расходящимися. Такого рода расходимости привели к



Фиг. 3.

серьезным трудностям в использовании теории возмущений уже во втором порядке. Однако можно легко просуммировать ряд, составленный из всех цепочек поляризационных петель. Тогда находим

$$\epsilon(k\omega) = 1 + 4\pi\alpha_0(k\omega),$$

где $\alpha_0(k\omega)$ — поляризуемость свободных электронов, соответствующая простой петлевой диаграмме.

6. Электронный газ служит моделью для электронов в металле, моделью, в которой решетка положительных ионов заменяется однородным фоном положительных зарядов. Плотность электронов в металлах такова, что мы встречаемся со значениями r_s порядка

$$1,8 \leq r_s \leq 5,5.$$

Таким образом, в данном случае нельзя использовать результаты, полученные с помощью приближения хаотических фаз, даже если внести какие-либо поправки к ним, полученные при помощи теории возмущений, так как разложение в ряд в случае элек-

тронного газа высокой плотности теряет смысл при $r_s \gg 1$. Предлагались различные методы интерполяции (Хаббард [11], Нозьер и Пайнс [12]) для расчета энергии основного состояния электронного газа в случае промежуточной плотности, соответствующей плотности электронного газа в металлах. Было найдено, что эти методы дают результаты с точностью около 10%. Экспериментальные результаты по определению энергии связи в щелочных металлах находятся в хорошем соответствии со значениями, предсказанными с помощью интерполяционных формул.

7. Наиболее естественный способ развития теории плазмонов в твердых телах основан на приближении хаотических фаз. Теоретические предсказания находятся в хорошем количественном соответствии с результатами опытов по неупругому рассеянию электронов (с энергией порядка $kэв$) в тонких пленках, изготовленных из испытуемого твердого вещества, и подтверждают существование плазмонов, представляющих собой вполне определенные элементарные возбуждения в широком классе твердых тел (Пайнс [65], Нозьер и Пайнс [64]).

Твердые тела с низкой плотностью электронов

1. При достаточно низких плотностях кулоновское взаимодействие оказывает преобладающее влияние на поведение электронов, если интенсивность взаимодействия не ниже определенного значения. В этом случае можно считать, что электроны образуют устойчивую решетку на фоне однородного положительного заряда, так как потенциальная энергия стремится расположить электроны на возможно большие расстояния, а кинетическая энергия недостаточна для предотвращения локализации электронов в определенных местах (Вигнер [69, 70]).

2. Энергию основного состояния можно представить в виде разложения по степеням $r_s^{1/2}$ (Вигнер [69], Карр [57]).

$$E_0 = \frac{1,79}{r_s} + \frac{2,66}{r_s^2} + \frac{a}{r_s^2} + \frac{b}{r_s^{3/2}} + \dots$$

Первый член — потенциальная энергия электронов, локализованных в определенных местах, второй — энергия нулевых колебаний электронов около их положений равновесия, третий и последующие члены разложения возникают вследствие ангармоничности колебаний решетки. Имеются также члены, пропорциональные $\exp(-cr_s^{1/2})$, возникающие из-за наличия обменных эффектов (Карр [57]).

3. С повышением плотности электронного газа его «кристаллическая» структура пропадает. Подсчеты показывают, что это происходит при $r_s \gtrsim 20$ (Нозьер и Пайнс [12]). Таким образом, электронное твердое тело представляет собой предельный случай очень низкой плотности электронного газа.

Разреженный ферми-газ с произвольным короткодействующим взаимодействием типа отталкивания

1. Энергию основного состояния, приходящуюся на одну частицу системы, можно представить в виде разложения в ряд по степеням f_0/r_0 , где f_0 — длина рассеяния для свободной частицы, а r_0 — среднее расстояние между частицами. Имеем (Ли и Янг [75], де Доминисис и Мартин [73], Галицкий [18]):

$$\frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} \left[1 + \frac{10}{9\pi} p_F f_0 + \frac{4}{21\pi^2} (11 - 2 \ln 2) p_F^2 f_0^2 + \dots \right].$$

2. Существует два типа элементарных возбуждений.

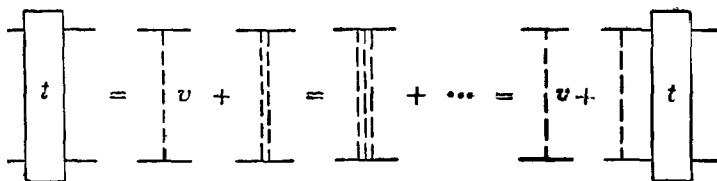
а. Квазичастицы, для которых зависимость энергии от импульса в непосредственной близости к сфере Ферми определяется формулой (Галицкий [18])

$$\begin{aligned} \epsilon(p) = & \frac{p_F^2}{2m} \left\{ \frac{p^2}{p_F^2} + \frac{4}{3\pi} p_F f_0 + \frac{4}{15\pi^2} p_F^2 f_0^2 [11 - 2 \ln 2] - \right. \\ & - \frac{16}{15\pi^2} p_F^2 f_0^2 \left(\frac{p}{p_F} - 1 \right) (7 \ln 2 - 1) - \\ & \left. - i \frac{2 p_F^2 f_0^2}{\pi} \left(\frac{p}{p_F} - 1 \right)^2 + \dots \right\}. \end{aligned}$$

б. Колебания нулевого звука с энергией (Готфрид и Пичмен [74]):

$$E(p) = \frac{pp_F}{m} \left\{ 1 + 0,27 \left[\exp \left(-\frac{\pi}{p_F f_0} \right) \right] \times \right. \\ \left. \times \left[1 + 0,57 \frac{p^2}{p_F^2} \exp \frac{2\pi}{p_F f_0} \right] \right\}.$$

3. Система низкой плотности характеризуется параметром разложения f_0/r_0 . Это отражает тот факт, что основной интересующий нас эффект — многократное взаимодействие пары изолированных частиц, при



Фиг. 4.

котором взаимодействие с другими присутствующими в среде частицами приводит к незначительным поправкам. Таким образом, если возбуждена пара частиц, то они предпочитают скорее рассеиваться повторно одна на другой, чем создавать пары частица — дырка (экранирование), и т. п. Учет многократного рассеяния позволяет исследовать системы с произвольным значением «отталкивающего» взаимодействия, включая случай твердых сфер.

4. Главное приближение влечет за собой суммирование так называемых «лестничных диаграмм», характерных для задач многократного рассеяния (Бракнер [38], Галицкий [18]). В низшем порядке заменяют графический элемент простого взаимодействия частиц на такой, в котором учитывается повторное рассеяние рассматриваемой пары частиц. В этом случае мы имеем диаграмму, изображенную на фиг. 4. Соответствующее интегральное уравнение можно легко

решить в пределе низкой плотности, тогда в рассматриваемом приближении получаем

$$t = \frac{4\pi f_0}{m}.$$

Таким образом, эффект многократного взаимодействия можно учесть, если заменить каждое элементарное взаимодействие длиной рассеяния — такое приближение эквивалентно использованию псевдопотенциалов (Ли, Хуан Кунь и Янг [21], Ли и Янг [88]).

5. Разреженный ферми-газ служит моделью для объяснения поведения ядерной материи и He^3 . Это не совсем удобная модель, так как ни одна из этих систем не является вполне разреженной. Более того, в обеих системах существуют силы притяжения, которые изменяют поведение системы вследствие появления парных корреляций, характерных для сверхпроводников. Основные расчеты для ядерной материи и He^3 были проделаны Бракнером и сотрудниками [38] с помощью методов, эквивалентных суммированию определенных групп диаграмм до бесконечного порядка теории возмущений. Применимость вычислений Бракнера оценить трудно.

Модель сверхпроводимости Бардина — Купера — Шриффера

1. Бардин, Купер, Шриффер [28] рассмотрели систему фермионов, эффективное взаимодействие которых, имеющее характер притяжения, постоянно для частиц, находящихся в области, близкой к поверхности Ферми, и равно нулю всюду вне ее. Они получили выражение для разности энергий нормального и сверхпроводящего состояний, которая для случая слабых сил притяжения между фермионами определяется формулой

$$\Delta E = -2N(0) \omega^2 \exp\left[-\frac{2}{N(0)V}\right].$$

Здесь ω — энергетическая ширина, на которую распространяется над поверхностью Ферми действие

притяжения, V — интенсивность притяжения, а $N(O)$ — плотность энергетических состояний у поверхности Ферми.

2. Элементарными возбуждениями могут быть:

а. Квазичастицы, энергия которых имеет вид

$$E(p) = [\tilde{\epsilon}^2(p) + \Delta^2]^{1/2},$$

где $\tilde{\epsilon}(p)$ — энергия квазичастицы «нормального состояния», измеренная по отношению к энергии частицы на поверхности Ферми, и Δ — энергетическая щель, определяемая для слабого взаимодействия выражением

$$\Delta = 2\omega \exp\left[-\frac{1}{N(O)V}\right].$$

б. Коллективные возбуждения двух типов (Андерсон [32], Риккайзен [33], Боголюбов [36] и др.). Первый тип — плазмоны, для которых зависимость энергии от импульса для сверхпроводящего состояния лишь незначительно модифицируется за счет изменения коэффициента при p^2 . Второй — экситоны, соответствующие паре связанных квазичастиц, движение центра масс которых характеризуется импульсом p . Спектр этих возбуждений сильно зависит от эффективного двухчастичного взаимодействия (Бардазис и Шриффер [100]).

3. Основной физический эффект, к которому приводит наличие сил притяжения между фермионами, заключается в образовании пар частиц с противоположными импульсами и спинами. Такие частицы являются выделенными, так как в соответствующем приближении две частицы с противоположными спинами и импульсами образуют связанные состояния вне зависимости от величины силы притяжения между ними (Купер [27]). Таким образом, сфера Ферми оказывается нестабильной по отношению к образованию связанных пар. Можно считать, что в теории Бардина — Купера — Шриффера непротиворечивым образом учитывается возможность образования виртуальных состояний связанных пар. Найденное основное состояние (его нельзя получить вычислениями

с помощью теории возмущений, основанными на волновой функции «нормального состояния») стабильно по отношению к появлению пар частиц в силу существования энергетической щели 2Δ , препятствующей образованию пары квазичастиц. Природа основного состояния в теории Бардина — Купера — Шриффера такова, что между частицами с противоположными спинами и импульсами существуют корреляции большого радиуса действия ($\sim 10^{-4}$ см) и, как уже неоднократно указывалось, эти корреляции приводят к ряду поразительных и существенных когерентных эффектов.

4. Теоретико-полевая формулировка теории Бардина — Купера — Шриффера (Намбу [107], Пайнс и Шриффер [110], Беляев [102]), которую мы в дальнейшем кратко обсудим, показывает, что эта теория сводится к суммированию всех диаграмм, описывающих многократное рассеяние, с дополнительным условием, что при рассеянии возможен переход как в виртуальное состояние связанной пары, так и из него. Зависимость вероятности образования связанного состояния от импульса имеет энергетическую щель. Таким образом, выражаясь принятым языком, теория Бардина — Купера — Шриффера постулирует существование состояний связанной пары и позволяет вычислить вероятность перехода в эти состояния, исходя из условия непротиворечивости используемых уравнений, что является новым радикальным средством теории Бардина — Купера — Шриффера, — средством, которое позволяет отказаться от традиционных решений теории возмущений.

5. Подсчитать поправки к теории Бардина — Купера — Шриффера затруднительно, поэтому трудно оценить ее точность. Если в гамильтониане оставить только те члены, которые описывают взаимодействие между частицами с противоположными импульсами и спинами, то решение Бардина — Купера — Шриффера, как можно показать, имеет точность порядка $1/N$ (Бардин и Риккайзен [34], Боголюбов [103]). Для случая более общих взаимодействий нужно доказать (в большинстве случаев можно надеяться это сделать),

что выражение Бардина — Купера — Шриффера для энергетической щели справедливо в приближении слабого взаимодействия, так как разница в энергии нормального и сверхпроводящего состояний чрезвычайно мала по сравнению с другими рассматриваемыми энергетическими величинами (обменная энергия, корреляционная энергия и др.).

6. Эффективное взаимодействие между электронами в металле складывается из экранированного кулоновского потенциала и обязанного ионной поляризации взаимодействия, которое зависит от частоты и соответствует притяжению, когда частоты виртуальных возбуждений меньше характерной энергии фононов, и отталкиванию — в противном случае. Силы притяжения, которые можно рассматривать как возникающие вследствие обмена виртуальными фононами, являются причиной сверхпроводимости в большинстве металлов (однако нельзя произвольно исключать другие возможные механизмы, приводящие к притяжению электронов вблизи поверхности Ферми). В настоящее время неизвестна точная форма эффективного взаимодействия в реальных металлах, поэтому не существует строгого критерия для разделения металлов на нормальные и сверхпроводники. Некоторые предварительные вычисления, проведенные Пайнсом [108] и Морелом [106], показывают, что для получения приемлемой оценки величины введенного в теорию Бардина — Купера — Шриффера потенциала V весьма существенно принимать во внимание расположение данного элемента в периодической системе.

7. Теория Бардина — Купера — Шриффера чрезвычайно эффективна в предсказании физического поведения реальных сверхпроводников. Из имеющихся микроскопических теорий сверхпроводимости теория Бардина — Купера — Шриффера является наиболее успешной. Достаточно ввести единственный эмпирический параметр, чтобы эта теория дала хорошее согласие с экспериментом почти для всех свойств сверхпроводников (Бардин и Шриффер [101]).

Разреженный бозе-газ со взаимодействием типа отталкивания

1. Энергия основного состояния, приходящаяся на одну частицу (Ли, Хуан Кунь и Янг [21], Беляев [23], Гугенгольд и Пайнс [24]), имеет вид

$$\frac{E_0}{N} = \frac{1}{2} \frac{nf_0}{m} \left\{ 1 + \frac{16}{15\pi^2} (nf_0^3)^{1/2} + \right. \\ \left. + \frac{nf_0^3}{8\pi^2} \left[\frac{4}{3} - \frac{3}{\pi} \right] \ln nf_0^3 + \dots \right\},$$

где f_0 — длина рассеяния, а n — плотность числа частиц.

2. Параметр разложения $(nf_0^3)^{1/2}$. Это отношение длины рассеяния f_0 к радиусу действия корреляции $(nf_0)^{-1/2}$.

3. Энергия квазичастицы при больших длинах волн $p \ll (nf_0)^{1/2}$ (Беляев [23], Ли и Янг [88]) определяется выражением

$$E(p) = \frac{p}{m} (nf_0)^{1/2} \left\{ 1 + \frac{7}{6\pi^2} (nf_0^3)^{1/2} - \right. \\ \left. - \frac{3i}{640\pi} (nf_0^3)^{1/2} \left[\frac{p}{(nf_0)^{1/2}} \right]^4 + \dots \right\}.$$

4. Возбуждения колебаний плотности в тех порядках, в которых производились вычисления [низший порядок по $(nf_0^3)^{1/2}$], обладают таким же спектром, как и квазичастицы.

5. Все основные физические характеристики рассчитываются, исходя из допущения о макроскопическом заполнении состояния с нулевым импульсом (Боголюбов [20]). Вследствие этого операторы рождения и уничтожения частиц с нулевым импульсом a_0^+ и a_0 рассматриваются как c -числа. При соблюдении необходимых мер предосторожности можно применить методы теории поля (Беляев [22], Гугенгольд и Пайнс [24]) к системе с полученным указанным образом не сохраняющим общее число частиц гамильтонианом. В приведенном выше разложении главные члены с помощью расчета, аналогичного расчету в случае разряженного ферми-газа, получены как в при-

ближении хаотических фаз (эквивалентном методу канонических преобразований Боголюбова [20]), так и с помощью приближения «лестничных диаграмм», в котором каждый графический элемент, изображающий взаимодействие, заменяется другим, отражающим многократное рассеяние. Суммирование, соответствующее приближению хаотических фаз, необходимо произвести для того, чтобы избежать расходимости в членах (второго порядка и выше) разложения теории возмущений; указанная трудность сильно напоминает ту, с которой мы встречаемся в случае электронного газа. Учет же членов, отвечающих многократному рассеянию, будет соответствовать приближению низкой плотности.

б. Разреженный бозе-газ служит моделью для изучения явлений сверхтекучести, наблюдаемой в He^4 , так как линейность по импульсу спектра квазичастиц обеспечивает сверхтекучесть. Однако эта модель не отражает действительной ситуации в He^4 , потому что величины плотности и длины рассеяния атомов гелия таковы, что степенное разложение по $(nf_0^3)^{1/2}$ становится бессмысленным. Спектр элементарных возбуждений, наблюдавшийся в экспериментах по рассеянию медленных нейтронов, находится в хорошем согласии с расчетами Фейнмана и Козна [84]. Точного микроскопического обоснования этого спектра не существует; наиболее хорошее приближение дано Бракнером и Савадой [81], которые просуммировали определенный класс членов высших порядков ряда теории возмущений, используя способ, напоминающий вычисления Бракнера [38] в теории ядерной материи. Их вычисления, приведшие к верному в количественном отношении спектру, не объяснили размытия состояния с нулевым импульсом, вызываемого взаимодействием 4 частиц.

Ядерные системы

Приближения, развитые в теории многих тел, недавно нашли успешное применение при определении энергетических уровней, магнитных моментов и

других характеристик конечных ядер. Используемая модель представляет собой набор независимых частиц, расположенных по типу оболочечной модели ядра и проявляющих слабое эффективное взаимодействие. Оказывается, что существенное влияние на ядерную систему оказывают как парные корреляции теории Бардина — Купера — Шриффера, так и коллективные возбуждения и характеристики экранирования в приближении хаотических фаз; при надлежащем способе использования этих методов получаются неожиданно хорошие представления о свойствах основного состояния и низших возбужденных состояний (Беляев [78], Баренджер [77], Моттelson [80]).

§ 6. РЯДЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ И СООБРАЖЕНИЯ СТАБИЛЬНОСТИ

Я хотел бы в заключение этой главы сделать несколько замечаний о характере рассмотренных здесь модельных задач и об общих вопросах степенных разложений теории возмущений.

Во-первых, мне бы хотелось обратить внимание на тот факт, что в различных рассматриваемых задачах, содержащих разложения в ряд, всегда приходится встречаться с трудностями, связанными с вопросами аналитической зависимости функций от константы связи (параметр теории возмущений). Это, вероятно, не случайно. Может показаться, что природа «не согласна» с применением степенных разложений в проблеме многих тел; полагаю, что то же самое имеет место в других областях физики (например, в квантовой электродинамике).

Рассмотренные модели, за исключением теории сверхпроводимости, позволяли применять теорию возмущений. Верно, что она часто применялась в перестроенном виде, но и это не гарантирует справедливости ее применения. Я считаю, что нельзя быть уверенным в отсутствии иного основного состояния системы (например, более упорядоченного), отличного от полученного с помощью теории возмущений,

даже тогда, когда мы имеем дело с областью, в которой разумно введенные степенные разложения оказываются сходящимися. Ряд примеров подтверждает это. Первым служит тот факт, что нельзя правильно описать несферическую поверхность Ферми, исходя из характеристик сферических поверхностей и используя теорию возмущений (Кон и Латтинджер [46]). Вторым является непригодность методов теории возмущений для построения теории сверхпроводимости, в которых допускается наличие только «нормальных» типов промежуточных состояний. Еще один пример — это безуспешность применения теории возмущений для получения упорядоченного основного состояния ферромагнетика.

Единственное, что обнадеживает при применении теории возмущений, — это содержащиеся в этой теории сигналы об опасности. Эти сигналы проявляются в виде неправильных результатов: величина, которая должна удовлетворять принципу причинности, не удовлетворяет ему; данное образование элементарных возбуждений оказывается неустойчивым и т. д. Так, например, как уже упоминалось, Купер [27] нашел в случае системы фермионов со взаимодействием типа притяжения, что сфера Ферми проявляет нестабильность по отношению к образованию пар частиц с противоположными импульсами и спинами. Такое поведение свидетельствует о неадекватности теории возмущений и служит ключом к лучшей теории. Оно наводит на мысль об особой роли корреляции между частицами с противоположными спинами и импульсами, которые необходимо учесть в теории с помощью методов, не связанных с теорией возмущений. В самом деле, как впервые показано Кадановым и Мартином [105], в задаче Купера для случая отличной от нуля температуры можно определить температуру перехода в состояние сверхпроводимости, найдя точку, в которой впервые проявляется эта нестабильность. Другие примеры указывают на возможность выявить антиферромагнитные свойства в ферми-системах с низкой плотностью (Оверхаузер [76], Савада и др. [52]), а также на фазовый переход из газа в жидкость (Мартин

и Мермин [50]). Можно надеяться, что обобщение этих соображений стабильности будет перспективным для других задач, таких, как общий фазовый переход из твердого состояния в жидкое, переход из состояний свободного электронного газа в состояние «электронного твердого тела» при низких плотностях, переход He^4 из жидкого состояния в твердое.

Я предлагаю проявить осторожность в вопросе о приемлемости результатов теории возмущений, так как мы находимся на довольно примитивной стадии в способности различать сигналы об опасности. Так, например, устойчивость довольно простых типов коллективных возбуждений была исследована с помощью достаточно простых приближений. Использование более тонких усовершенствованных приближений, вероятно, может привести к обнаружению новых случаев неустойчивости. Эти соображения особенно касаются физиков, изучающих твердое тело, которые хотели бы знать, действительно ли существует строго определенная поверхность Ферми, характеризуемая разрывом в одночастичной функции распределения при $\rho = \rho_F$. Латтинджер [48] для изучения данного вопроса использовал теорию возмущений и показал, что если теория возмущений пригодна, то такой разрыв существует. Ван Хов [56] исследовал задачу для фермионов в случае отталкивающего взаимодействия, близкую к задаче Купера; он обнаружил определенные отклонения от нормы в рассеянии двух частиц с противоположными спинами и импульсами, что может свидетельствовать о слабой неустойчивости системы и об отсутствии разрыва функции распределения. Этот вопрос остается открытым.

2

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

§ 1. ИСТОРИЯ РАЗВИТИЯ

В теории многих тел использовалось огромное количество математических методов, разработанных в теории поля, а также методов, не имеющих к ней отношения. Ранние вычисления носили почти исключительно вариационный характер (например, метод Хартри—Фока, расчеты Вигнера [69, 70] корреляционной энергии для свободного электронного газа). Вариационные методы с большим успехом применяются до сих пор, о чем свидетельствуют расчеты газа, молекулы которого можно рассматривать как твердые сферы (Ястров [43] и др.), и в особенности определение спектра жидкого He^4 (проведенное Фейнманом и Коэном [84]), причем до сих пор этот спектр является лучшим из имеющихся для данной системы. Вычисления по ядерной материи Бракнера и сотрудников можно отнести к этой же категории.

Следующий класс развитых методов основывался на последовательном введении коллективных координат для выявления и описания коллективных возбуждений системы (Томонага [54], Бом и Пайнс [4], Боголюбов и Зубарев [37], Липкин [47] и др.). В методе коллективных координат для описания коллективных возбуждений вводятся дополнительные координаты, а затем выполняется ряд канонических преобразований, чтобы отделить коллективные возбуждения от движений отдельных частиц. Метод коллективных

координат эффективен как для описания коллективных возбуждений, так и для проведения строгого доказательства сопровождающих их появление когерентных эффектов (экранирования). Этот метод страдает тем недостатком, что требует введения дополнительных координат с соответствующим числом дополнительных условий, налагаемых на волновую функцию системы. Дополнительные условия не затрагивают ни энергии основного состояния, ни спектра коллективных возбуждений; однако они могут изменить спектр индивидуальной частицы. Этот метод нашел свое основное применение в теории электронного газа (и электронов в твердых телах), где было дано строгое доказательство эквивалентности полученного с его помощью выражения для энергии основного состояния с выражениями, полученными другими методами (Нозьер и Пайнс [12]).

Достижения последнего времени естественно классифицировать следующим образом:

1. Метод уравнений движения, с помощью которого стремятся получить элементарные возбуждения непосредственно, решая приближенно систему уравнений для вторично-квантованных операторов. Этот метод был предложен в работе Бома и Пайнса [4] и использовался в несколько измененной форме Линдхартом [63] для подсчета диэлектрической проницаемости электронного газа, зависящей от частоты и волнового вектора. Метод был доведен до совершенства в трудах Савады и др. [8], Браута [9], Андерсона [32], Риккайзена [33], Зула [53], Боголюбова [36] и др. Метод уравнений движения особенно полезен при рассмотрении электронного газа и вопросов сверхпроводимости. Он представляет собой как бы «обедненный» вариант элегантного подхода Мартина и Швингера [51], в котором система связанных уравнений для различных функций Грина данной системы решается приближенно. Другой вариант этого метода, связанный с матрицей плотности, дан Эренрайхом и Коэном [14] и Голдстоуном и Готтфридом [19]; последние выявили связь метода с теорией ферми-жидкости Ландау.

Этот метод также известен под названием временного метода Хартри — Фока (Боголюбов [36]).

2. Методы квантовой теории поля используются для получения выражений для энергии основного состояния и спектра возбуждений для системы взаимодействующих фермионов. Голдстоун [1] использовал формулировку Фейнмана временной теории возмущений для обоснования теории возмущений Бракнера (суммирование вкладов только от связанных диаграмм) и получения выражения для энергии основного состояния. Гугенгольц [41] с помощью временной теории возмущений Ван Хова также получил энергию основного состояния, а Гугенгольц и Ван Хов [42] нашли тем же методом выражение для спектра возбуждений индивидуальных частиц. Хаббард [2], используя фейнмановский формализм, подошел к вопросу о коллективном движении с точки зрения теории поля и получил другое выражение для энергии основного состояния. Этот формализм также использовали Галицкий и Мигдал [3], которые ввели одно- и двухчастичные функции Грина для описания одночастичных и коллективных возбуждений и показали, как найти энергию основного состояния, зная одночастичную функцию Грина. Более поздние исследования того же направления развивались в работах Клейна и Пренга [45], Мартина и Швингера [51], Дюбуа [39]. Правила для определения одночастичных функций Грина посредством соответствующих фейнмановских диаграмм можно найти в статьях Галицкого [18], Клейна и Пренга [45], Дюбуа [39]. Мартин и Швингер [51] обсудили пути нахождения этой функции Грина с помощью решения системы с бесконечно большим числом связанных интегральных уравнений. Для частного случая свободного электронного газа Нозьер и Пайнс [13] показали, что знание продольной составляющей диэлектрической проницаемости, зависящей от частоты и волнового вектора, достаточно для получения энергии основного состояния и спектра возбуждений колебаний плотности, и обсудили метод вычисления, который явно не связан с теорией возмущений.

3. Суммирование определенного класса членов ряда теории возмущений необходимо для получения энергии основного состояния и спектра возбуждений. Первые такие вычисления применительно к ядерной материи были произведены Бракнером [38] и сотрудниками; при этом они использовали теорию возмущений Рэля — Шредингера. Гелл-Манн и Бракнер [6] использовали диаграммы Фейнмана для вычисления энергии основного состояния свободного электронного газа высокой плотности. Последующие вычисления связаны с работами Хаббарда [11] и Дюбуа [60] по определению энергии основного состояния и плазменных колебаний свободного электронного газа, а также с исследованиями Галицкого [18], Готфрида и Пичмена [74] для ферми-газа низкой плотности.

4. Ландау [15, 16] развил полуфеноменологическую теорию нормальных ферми-систем, в основе которой лежит допущение, что при достаточно низких температурах существует определенный набор квазичастиц, которые подчиняются статистике Ферми — Дирака. Эта теория применялась Ландау с сотрудниками к широкому классу физических проблем; Ландау [17] обсудил также некоторые вопросы этой теории с точки зрения теории поля. Обзор теории Ландау с многочисленными приложениями был сделан в статье Абрикосова и Халатникова [71].

5. Ввиду особой роли конденсата во взаимодействующей системе бозонов, потребовался пересмотр аппарата теории возмущений, развитого для системы фермионов. Боголюбов [20] в своей классической работе показал, что операторы рождения и уничтожения в состоянии с нулевым импульсом можно заменить c -числами; это позволило получить эффективный гамильтониан, часть которого могла быть диагонализирована с помощью канонического преобразования к новым переменным квазичастиц. Оригинальный метод Боголюбова применим только для слабого взаимодействия; Ли, Хуан Кунь и Янг [21] использовали приближение псевдопотенциалов, чтобы распространить теорию на произвольные сильные взаимодействия в случае систем с низкой плотностью; Бракнер

и Савада [81] получили тот же результат путем суммирования диаграмм теории возмущений. Модификация аппарата теории поля, необходимая из-за особой роли состояния с нулевым импульсом, получила дальнейшее развитие; усовершенствованный метод применялся к разреженному бозе-газу Беляевым [22, 23] и Гугенгольцем и Пайнсом [24].

6. Система взаимодействующих электронов и ионов в металлах представляет пример задачи, когда нужно одновременно различать эффекты, связанные со взаимодействием между самими частицами и взаимодействием между частицами и полем. Понимание этого вопроса является, конечно, основным при изучении сверхпроводимости. Бардин и Пайнс [25] использовали метод коллективных координат для получения решения в приближении хаотических фаз, а Мигдал [26] применил методы теории поля для суммирования широкого класса диаграмм теории возмущений, полученных для частной задачи, рассмотренной Фрѐлихом [97], в которой пренебрегают электрон-электронным взаимодействием, а учитывают только взаимодействия между электронами и фононами.

7. Как уже говорилось, обычные методы теории возмущений непригодны для проблемы сверхпроводимости. Бардин, Купер, Шриффер [28] первоначально разработали теорию вариационными методами; они показали, что сконструированное из спаренных частиц основное состояние лежит ниже нормального и отделено энергетической щелью от спектра возбуждений пар квазичастиц. Боголюбов [29] и Валатин [30] показали, что каноническое преобразование операторов рождения и уничтожения квазичастиц приводит к значительным математическим упрощениям теории Бардина, Купера, Шриффера. Теория сверхпроводимости на основе теоретико-полевого формализма развивалась в работах Горькова [31], Намбу [107], Беляева [102], Пайнса и Шриффера [109, 110]. Бардин и Риккайзен [34] показали, что для модельного гамильтониана решение, полученное на основании теории Бардина — Купера — Шриффера, справедливо с точностью до $1/N$, где N — число частиц системы. Вопрос

сы о роли коллективных возбуждений и градиентной инвариантности рассматривались Андерсоном [32], Риккайзенем [33], Пайнсом [108], Шриффером [111], Намбу [107], Боголюбовым [103], Кадановым и Мартином [105] и др.

В настоящих лекциях, очевидно, невозможно изложить все разнообразные подходы ко всем обсуждаемым задачам. Поэтому я начну с обзора общих математических методов описания элементарных возбуждений, основанных на методах теории поля. Затем будут кратко рассмотрены два подхода: метод уравнений движения и основанное на использовании фейнмановских диаграмм приближение временной теории возмущений. Почти нигде я не буду вдаваться в математические детали, а надеюсь передать дух методов, что позволит читателю провести самостоятельные расчеты простых задач и ориентироваться в текущей литературе.

§ 2 ВОЗБУЖДЕНИЯ КВАЗИЧАСТИЦ

Определение одночастичной функции Грина

Определим одночастичную функцию Грина с помощью выражения

$$G(p, \tau) = -i \langle \Psi_0 | T \{ C_p(\tau) C_p^\dagger(0) | \Psi_0 \rangle. \quad (2.1a)$$

Операторы и функции состояния даны в представлении Гейзенберга, в котором точная волновая функция основного состояния Ψ_0 не зависит от времени, а временная зависимость операторов рождения и уничтожения определяется согласно выражению

$$C_p(\tau) = e^{iH\tau} C_p(0) e^{-iH\tau}. \quad (2.2)$$

Оператор $C_p(0)$ не зависит от времени, H — точный гамильтониан системы многих тел, T — хронологический оператор Дайсона, который располагает более ранние времена справа. Таким образом, используя (2.2), имеем

$$G(p, \tau) = -i \langle \Psi_0 | C_p e^{-iH\tau} C_p^\dagger | \Psi_0 \rangle e^{iE_0\tau}, \quad \tau > 0, \quad (2.3a)$$

$$G(p, \tau) = \pm i \langle \Psi_0 | C_p^\dagger e^{iH\tau} C_p | \Psi_0 \rangle e^{-iE_0\tau}, \quad \tau < 0, \quad (2.3b)$$

где знак «+» берется для фермионов, а знак «—» — для бозонов; изменение знака в выражении (2.3 б) является следствием фермиевских перестановочных соотношений. Далее везде спиновый индекс фермиевских операторов будет опущен, за исключением тех случаев, когда может возникнуть недоразумение. $G(p, \tau)$ является фурье-образом зависящей от координат одночастичной функции Грина:

$$G(r, \tau) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \Psi(r, \tau) \Psi^\dagger(0) \} | \Psi_0 \rangle. \quad (2.16)$$

Мы ограничимся случаем равновесной пространственно-однородной системы, поэтому нет необходимости рассматривать одночастичную функцию Грина более общей структуры. Фурье-образ $G(p, \varepsilon)$ функции $G(p, \tau)$, определяемый соотношением

$$G(p, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G(p, \varepsilon) e^{-i\varepsilon\tau}, \quad (2.4)$$

имеет особо важное значение, так как аналитическое поведение фурье-образа $G(p, \varepsilon)$ вблизи действительной ε -оси, как мы увидим, определяет энергию и время жизни квазичастицы (Галицкий и Мигдал [3]).

Несколько простых примеров

Рассмотрим систему свободных частиц, для которой волновая функция основного состояния $|\Psi_0\rangle$ соответствует вакуумному состоянию $|0\rangle$. Тогда в силу (2.3а) и (2.3б) имеем

$$G_f(p, \tau) = \begin{cases} -ie^{-i\varepsilon(p)\tau}, & \tau > 0, \\ 0, & \tau < 0, \end{cases} \quad (2.5)$$

где

$$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$$

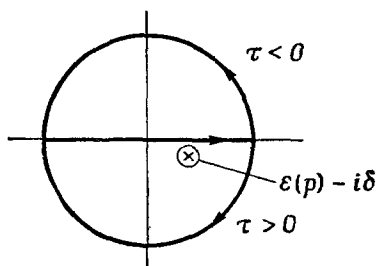
— энергия свободной частицы. Фурье-образ $G_f(p, \tau)$ определяется соотношением

$$G_f(p, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon(p) + i\delta}, \quad (2.6)$$

где δ — бесконечно малая величина, указывающая положение полюса на комплексной ϵ -плоскости. Чтобы убедиться в справедливости (2.6), рассмотрим функцию

$$G_f(p, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi} \left\{ \frac{e^{-i\epsilon\tau}}{\epsilon - \epsilon(p) + i\delta} \right\}.$$

Мы можем произвести интегрирование по ϵ , взяв контур интегрирования, изображенный на фиг. 5.



Фиг. 5.

Для $\tau < 0$ мы должны замыкать контур сверху действительной оси, так как тогда экспоненциальный множитель обеспечивает сходимость интеграла; мы получаем в результате нуль. Для $\tau > 0$ нужно замыкать контур интегрирования снизу действительной оси. Тогда с учетом вклада от полюса при $\epsilon = \epsilon(p)$, т. е. вычета $-2\pi i e^{-i\epsilon(p)\tau}$, получаем (2.5).

Рассмотрим теперь систему невзаимодействующих фермионов, для которой основным состоянием φ_0 является заполненная ферми-сфера с радиусом p_F . Тогда имеем

$$\begin{aligned} C_p \varphi_0 &= 0, & p > p_F, \\ C_p^+ \varphi_0 &= 0, & p < p_F. \end{aligned}$$

Поэтому функция Грина $G_0(p, \tau)$ определяется соотношением

$$G_0(p, \tau) = \begin{cases} iN_p e^{i\epsilon(p)\tau}, & \tau < 0, \\ -i(1 - N_p) e^{-i\epsilon(p)\tau}, & \tau > 0, \end{cases} \quad (2.7)$$

где

$$N_p = 1, \text{ если } p < p_F,$$

$$N_p = 0, \text{ если } p > p_F.$$

Ее фурье-образ $G_0(p, \epsilon)$ дается формулой

$$G_0(p, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon(p) + i\delta_p}, \quad \begin{matrix} \delta_p = +\delta, & p > p_F, \\ \delta_p = -\delta, & p < p_F. \end{matrix} \quad (2.8)$$

Производя интегрирование по ϵ , убеждаемся в справедливости (2.8). Замыкая контур интегрирования сверху действительной оси для $\tau < 0$, снизу для $\tau > 0$, мы приходим к выражению (2.7), так как δ_p изменяет знак при прохождении через значение $p = p_F$.

Заметим, что сингулярности $G(p, \epsilon)$ как в выражении (2.6), так и в выражении (2.8) определяют энергии квазичастиц. Далее заметим, что $G_0(p, \tau)$ описывает распространение дырки для $\tau < 0$. Эта функция равна нулю для $p > p_F$, а для $p < p_F$ она представляет амплитуду вероятности того, что если в некоторый отрицательный момент времени τ была рождена дырка, то она будет находиться в состоянии с тем же импульсом в момент времени, равный нулю. Для $\tau > 0$ $G_0(p, \tau)$ описывает распространение частицы точно так же, как $G_f(p, \tau)$.

Функция распределения

Из определения (2.1) следует, что

$$G(p, 0^-) = +i \langle \Psi_0 | C_p^+ C_p | \Psi_0 \rangle = iN_p,$$

где 0^- означает стремление τ к 0 со стороны отрицательных значений τ . Здесь N_p — среднее значение оператора числа частиц $C_p^+ C_p$. Непосредственно из определения (2.4) имеем

$$N_p = \frac{1}{2\pi i} \int_C d\epsilon G(p, \epsilon), \quad (2.9a)$$

где контур интегрирования C должен проходить сверху действительной оси, так как мы рассматри-

ваем предел $\tau \rightarrow 0^-$. Следовательно, зная $G(p, \epsilon)$, мы можем определить функцию распределения N_p для системы взаимодействующих частиц.

Далее заметим, что

$$G(p, 0^+) = -i(1 - N_p). \quad (2.96)$$

Таким образом, $G(p, \tau)$ претерпевает разрыв при $\tau = 0$; величина разрыва равна $G(p, 0^+) - G(p, 0^-) = -i$.

Спектральное представление

Теперь мне бы хотелось обсудить некоторые формальные свойства точной функции Грина. Следуя статье Галицкого и Мигдала [3], я хочу воспроизвести здесь некоторые ее детали, потому что и полученные результаты, и использованные методы равным образом полезны для обсуждения свойств других функций Грина, диэлектрической постоянной электронного газа и т. д. Я воспроизведу рассуждения, приведшие к спектральному представлению для одночастичной функции Грина, отсылая читателя, интересующегося деталями, к статье Галицкого и Мигдала [3].

Начнем с введения в наше выражение (2.3) полного набора промежуточных состояний для функции $G(p, \tau)$. Мы находим

$$\begin{aligned} G(p, \tau) &= -i \sum_n \langle \Psi_0 | C_p | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | e^{-iH\tau} C_p^\dagger | \Psi_0 \rangle e^{iE_0\tau} = \\ &= -i \sum_n |(C_p^\dagger)_{n0}|^2 e^{-i(E_n - E_0)\tau}, \quad \tau > 0, \end{aligned} \quad (2.10)$$

считая, что полный гамильтониан действует на точное промежуточное состояние n , которое обладает энергией E_n и импульсом p и соответствует состоянию системы из $N + 1$ частицы. Теперь запишем

$$\begin{aligned} E_n(N + 1) - E_0(N) &= E_n(N + 1) - E_0(N + 1) + \\ &+ E_0(N + 1) - E_0(N) = \omega_{n0} + \mu, \end{aligned} \quad (2.11)$$

где ω_{n0} — энергия возбуждения системы из $N + 1$ частицы, а

$$\mu = E_0(N + 1) - E_0(N) \quad (2.12)$$

— величина изменения энергии основного состояния при прибавлении к системе одной частицы, называемая химическим потенциалом. Можно сделать то же самое для функции $G(p, \tau)$ при $\tau < 0$ и получить

$$G(p, \tau) = +i \sum_n |(C_p)_{n0}|^2 e^{i(E_n - E_0)\tau}, \quad \tau < 0, \quad (2.13)$$

где промежуточное состояние теперь имеет импульс $-p$ и соответствует состоянию системы из $N - 1$ частицы. Можно снова записать

$$E_n(N-1) - E_0(N) = \omega'_{n0} - \mu', \quad (2.14)$$

где ω'_{n0} — энергия возбуждения системы из $N - 1$ частицы, а μ' — химический потенциал при переходе от $N - 1$ частицы к N частицам. Если предположить, что мы имеем дело с большой системой (которая инвариантна при отражении пространственных осей), то можно положить

$$\omega_{n0} = \omega'_{n0}, \quad \mu' = \mu$$

с точностью порядка $1/N$. Тогда находим

$$G(p, \tau) = -i \sum_n |(C_p^+)_{n0}|^2 e^{-i(\omega_{n0} + \mu)\tau}, \quad \tau > 0, \quad (2.15a)$$

$$G(p, \tau) = +i \sum_n |(C_p)_{n0}|^2 e^{i(\omega_{n0} - \mu)\tau}, \quad \tau < 0, \quad (2.15b)$$

где энергии возбуждений ω_{n0} всегда положительны.

Заметим далее, что мы имеем дело с большим числом состояний, близко расположенных друг к другу, и поэтому можем перейти в выражениях (2.15) от сумм к интегралам, введя спектральные функции.

$$\begin{aligned} A(p, \omega) &= \sum_n |(C_p^+)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}), \\ B(p, \omega) &= \sum_n |(C_p)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Тогда имеем

$$G(p, \tau) = -i \int_0^{\infty} d\omega A(p, \omega) e^{-i(\omega + \mu)\tau}, \quad \tau > 0. \quad (2.17a)$$

$$G(p, \tau) = +i \int_0^{\infty} d\omega B(p, \omega) e^{i(\omega - \mu)\tau}, \quad \tau < 0. \quad (2.17b)$$

Далее, применяя способ, аналогичный использовавшемуся при нахождении $G_f(p, \epsilon)$ и $G_0(p, \epsilon)$, немедленно получаем

$$G(p, \epsilon) = \int_0^{\infty} d\omega \left[\frac{A(p, \omega)}{\epsilon - (\omega + \mu) + i\delta} + \frac{B(p, \omega)}{\epsilon + \omega - \mu - i\delta} \right]. \quad (2.18)$$

Соотношение (2.18) является точным. Это представление $G(p, \epsilon)$ с помощью спектральных функций $A(p, \omega)$ и $B(p, \omega)$ известно как представление Лемана в квантовой теории поля (Галицкий и Мигдал [3]). С помощью представления (2.18) Галицкий и Мигдал исследуют аналитические свойства $G(p, \epsilon)$ и получают дисперсионное соотношение, связывающее действительную и мнимую части этой функции.

Определение квазичастицы

Теперь я хочу показать, как можно подойти к определению квазичастицы с помощью выражений (2.17) и (2.18). Напомню, что $G(p, \tau)$ представляет собой амплитуду вероятности того, что частица, имеющая импульс p ($p > p_F$) при $t = 0$, будет обнаружена в состоянии с тем же импульсом в момент времени τ ; другими словами, $G(p, \tau)$ описывает распространение во времени частицы в состоянии с данным импульсом. Более того, из (2.17) видно, что это распространение определяется спектральной функцией $A(p, \omega)$. Для невзаимодействующей ферми-системы, сравнивая (2.8) и (2.18), непосредственно находим

$$A(p, \omega) = \delta \{ \omega - [\epsilon(p) - \mu] \} (1 - N_p). \quad (2.19a)$$

Распространение происходит, таким образом, без затухания, и частота колебания $G(p, \tau)$ соответствует энергии свободной частицы $\epsilon(p)$.

В случае взаимодействующей ферми-системы спектральная функция $A(p, \omega)$ не будет иметь вида простой δ -функции, и в общем случае ее поведение, определяемое величиной матричных элементов и размытием энергии, связанным с переходами $(C_p^+)_{n0}$ в (2.16), является довольно сложным. В самом деле, состояние $C_p^+ \Psi_0$ не является собственным состоянием системы из $N + 1$ частицы, а состоит из суперпозиции ряда таких состояний, распределенных по некоторому диапазону энергий. В результате этого состояние $C_p^+ \Psi_0$ должно иметь конечное время жизни, и его распространение, вообще говоря, сопровождается затуханием. Поэтому мы сталкиваемся со следующими вопросами:

1) При каких обстоятельствах плодотворна идея квазичастицы?

2) Если даже оправдана концепция квазичастицы, то каким образом можно найти, исходя из $A(p, \omega)$, зависимость энергии квазичастицы от импульса?

Для ответа на первый вопрос надо заметить, что если $G(p, \tau)$ описывается выражением

$$G(p, \tau) = -iZ_p e^{-i\tilde{\epsilon}(p)\tau} e^{-\Gamma_p \tau} \quad (2.19б)$$

для любого интервала времени τ , то введение понятия квазичастицы можно считать оправданным, так как (2.19б) описывает распространение состояния с энергией $\tilde{\epsilon}(p)$ и амплитудой Z_p , которое сохраняется в течение времени $\tau \sim 1/\Gamma_p$. Далее из (2.17а) следует, что для получения выражения (2.19б) спектральная функция $A(p, \omega)$ должна резко возрастать в окрестности $\omega = \tilde{\epsilon}(p) - \mu$. Предположим, что в этой окрестности поведение $A(p, \omega)$ описывается простой формулой

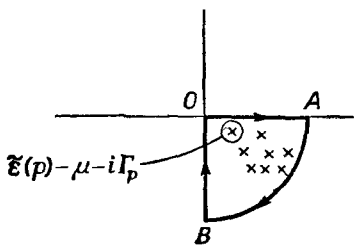
$$\begin{aligned} A(p, \omega) &= \frac{f(p, \omega)}{(\omega - [\tilde{\epsilon}(p) - \mu])^2 + \Gamma_p^2} = \\ &= \frac{Z_p}{\omega - [\tilde{\epsilon}(p) - \mu] + i\Gamma_p} \frac{1}{2\pi} + \frac{Z_p}{\omega - [\tilde{\epsilon}(p) - \mu] - i\Gamma_p} \frac{1}{2\pi}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Если в выражении (2.17а) провести интегрирование по ω , замыкая контур снизу действительной оси, то получим вклад от полюса (2.20), который как раз равен (2.19б).

Мы теперь вообще можем считать, что вычисление интеграла (2.17а) сводится к замыканию контура интегрирования снизу действительной оси, как показано на фиг. 6. По теореме Коши имеем

$$\int_0^{\infty} d\omega A(p, \omega) e^{-l(\omega+\mu)\tau} = \\ = 2\pi i \sum_n Z_n e^{-l\epsilon_n\tau} e^{-\Gamma_n\tau} + \int_{C'} d\omega A(p, \omega) e^{-l(\omega+\mu)\tau},$$

где первый член возникает в результате суммирования вычетов всех полюсов (которых может быть еще много, кроме обведенного на фиг. 6), лежащих в четвертом квадранте комплексной ω -плоскости. Второй член связан с контуром C' , которым является OAB . Мы видим, что для получения простого результата (2.19б) необходимо пренебречь вкладом от всех полюсов, кроме обведенного на фиг. 6,



Фиг. 6.

и вкладом, связанным с обходом по контуру C' . Первому условию легко удовлетворить, если считать за полюс квазичастицы тот, который лежит ближе всего к горизонтальной ϵ -оси и поэтому «затухает» медленнее всех других; по прошествии некоторого времени он останется один. Детальное исследование показывает, что можно также пренебречь вкладом от интеграла по контуру C' , т. е. выбрать τ достаточно большим, чтобы интерференция между различными состояниями, содержащимися в $C_p|\Psi_0\rangle$, позволила бы пренебречь интегрированием по C' , но не настолько

большим, чтобы вклад от полюса $\tilde{\epsilon}(p) - \mu - i\Gamma_p$ стал пренебрежимо малым.

Таким образом, понятие квазичастицы оправдано для времен, удовлетворяющих неравенству

$$\tau_c \leq \tau \leq \frac{1}{\Gamma_p},$$

где τ_c , порядка $[\tilde{\epsilon}(p) - \mu]^{-1}$, является другим характерным временем для нашей задачи. Более того, мы видим, что полюс аналитического продолжения $A(p, \omega)$ на четвертый квадрант комплексной ω -плоскости, лежащий вблизи действительной ω -оси, определяет энергию и время жизни квазичастицы. Наконец, легко показать, что в силу аналитических свойств $G(p, \epsilon)$, определяемых (2.18), полюс ее аналитического продолжения (на нижнюю полуплоскость), лежащий в непосредственной близости к действительной ϵ -оси, аналогичным образом определяет энергию и время жизни квазичастицы с импульсом p .

Этот результат вполне логичен; от функции $G_0(p, \epsilon)$, которая для $p > p_F$ имеет полюс в $\epsilon(p)$, смещенный на бесконечно малое расстояние в нижнюю полуплоскость ϵ , мы переходим к функции $G(p, \epsilon)$, которую для $p \geq p_F$ можно записать в виде

$$G(p, \epsilon) = \frac{Z_p}{\epsilon - \tilde{\epsilon}(p) + i\Gamma_p} + \text{Поправочные члены.} \quad (2.21)$$

Свойства квазичастицы определяются первым членом $G(p, \epsilon)$. Можно напомнить также, что Γ_p пропорционально $(p - p_F)^2$ в окрестности поверхности Ферми в результате ограничения, налагаемого на рассеяние квазичастиц принципом Паули.

Тот же самый метод можно применить к квазичастицам с импульсом $p < p_F$ (квазидыркам); легко найти тогда, что полюс, лежащий вблизи действительной оси аналитического продолжения $G(p, \epsilon)$ в верхнюю полуплоскость, определяет энергию и время жизни квазичастицы для $p < p_F$. Итак, мы видим, что Γ_p меняет знак при переходе через поверхность Ферми. Мигдал использовал этот факт для определения поверхности Ферми, исходя из того, что функция

распределения частицы при переходе через значение импульса, равное p_F , испытывает разрыв. Для значений p , непосредственно примыкающих к p_F , поправочные члены в (2.21) по Мигдалу можно записать в виде функции $f(p, \epsilon)$, регулярной в точке $\epsilon_p - i\Gamma_p$. Следовательно, используя определение (2.9а), находим распределение частиц по импульсам N_p :

$$N_p = \begin{cases} Z_p + N'_p & p = p_F - \delta, \\ N'_p & p = p_F + \delta, \end{cases} \quad (2.22)$$

так как полюс движется сверху вниз через ϵ -ось; при этом импульс p меняется от меньших значений к большим (проходя значение p_F).

Поэтому, как видно из выражения (2.21), величина Z_p , характеризующая «мощность» полюса квазичастицы в точке ϵ_p , определяет величину разрыва распределения N_p на поверхности Ферми, т. е.

$$Z_p = N_{p_{F^+}} - N_{p_{F^-}}.$$

Вычисления, основанные на применении теории возмущений, относящиеся к разреженному ферми-газу и электронному газу высокой плотности, приводят к результатам, согласующимся с формулой (2.21); величина Z_p была вычислена для этих моделей (Галицкий [18], Даниэль и Воско [59]). Как уже упоминалось, существование разрыва должно рассматриваться как свойство «нормальных» ферми-систем в том смысле, что к ним можно применять теорию возмущений, принимая $G_0(p, \epsilon)$ за невозмущенную величину (Латтинджер [48]). Мы знаем, что сверхпроводник не обладает этим свойством, а обладает ли на самом деле этим свойством какая-либо другая система — этот вопрос остается открытым.

§ 3 ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАНИЙ ПЛОТНОСТИ И КОЛЛЕКТИВНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ СИСТЕМЫ

Запаздывающая функция реакции системы

Возвратимся теперь к описанию реакции системы многих тел на внешние возмущения, а следовательно, к рассмотрению элементарных возбуждений, которые

можно надеяться наблюдать непосредственно с помощью соответствующего эксперимента. Мы ограничимся случаем продольного внешнего воздействия, которое приводит к колебаниям плотности системы; используемые методы исследования можно легко обобщить на случай любого внешнего поля (например, Галицкий и Мигдал [3] вычисляют реакцию системы на слабое электромагнитное поле). Рассмотрим взаимодействие вида

$$H_{\text{ext}} = \sum_k V_k \rho_k r_k(t),$$

где $r_k(t)$ описывает (через матричный элемент V_k) зависящее от времени внешнее воздействие на систему. Мы уже рассматривали пример одного такого возмущения, создаваемого одной частицей:

$$r_k(t) = \frac{1}{\Omega} \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}(t)],$$

где $\mathbf{R}(t)$ — координата частицы. В качестве другого примера мы можем считать, что $r_k(t)$ — пробный заряд, помещенный в электронный газ. В этом случае реакцию системы можно выразить с помощью диэлектрической проницаемости $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$, зависящей от частоты продольных колебаний и волнового вектора (Нозьер и Пайнс [13]).

Представляет интерес найти временную функцию, характеризующую реакцию системы на внешнее воздействие. Иными словами, желательно подсчитать среднее значение $\rho(\mathbf{r}, t)$ при наличии возмущения, т. е. величину $\langle \Psi_a | \rho(\mathbf{r}, t) | \Psi_a \rangle$, где Ψ_a — волновая функция системы при наличии возмущения. Внешнее воздействие на систему должно быть малым. При таком внешнем возмущении энергетические уровни самой системы многих тел заметно не нарушаются, и получаемая информация характеризует саму систему многих тел в гораздо большей мере, чем результирующую систему: данная система плюс возмущение. Мы считаем, что это условие вполне удовлетворено, а поэтому для вычисления реакции системы на данное воздействие можно пользоваться вторым приближением теории возмущений. В связи с этим полезно разложить в ряды

Фурье и внешнее возмущение $r_k(t)$ и реакцию системы $\rho_k(t)$, потому что каждая фурье-компонента может изучаться независимо.

Прежде чем производить вычисления, необходимо сказать несколько слов о граничных условиях. В настоящей задаче интересно определить адиабатическую реакцию системы многих тел, т. е. реакцию системы на воздействие, которое не нагревает систему. Это можно сделать, если считать, что возмущение было включено адиабатически в далеком прошлом и постепенно развивалось до момента времени $t = 0$, с которого мы начали изучать реакцию системы. Используя такое граничное условие и рассматривая каждую компоненту Фурье независимо, найдем теперь реакцию системы $\langle \rho_{k\omega}(t) \rangle$ в случае воздействия вида

$$V_k r_k \rho_k e^{-i\omega t} e^{\delta t},$$

где δ — бесконечно малая величина. С помощью временной теории возмущений (см., например, Нозьер и Пайнс [13]) после несложных вычислений получаем для среднего значения ρ_k при наличии возмущения r_k следующий результат:

$$\langle \rho_{k\omega}(t) \rangle = V_k r_k e^{-i\omega t} \sum_n \left[\frac{|(\rho_k)_{n0}|^2}{\omega - \omega_{n0} + i\delta} - \frac{|(\rho_{-k})_{n0}|^2}{\omega + \omega_{n0} + i\delta} \right]. \quad (2.23)$$

Величины ω_{n0} представляют собой точные частоты возбужденных состояний системы многих тел, связанных с колебаниями плотности ρ_k . Если использовать свойство инвариантности системы при отражении пространственных осей (матричные элементы и частоты возбуждений состояний ρ_k и ρ_{-k} идентичны), то будем иметь

$$\langle \rho_{k\omega}(t) \rangle = V_k r_k e^{-i\omega t} \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\delta} \right). \quad (2.24)$$

От свойств системы многих тел зависит только функция

$$F^r(k\omega) = \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\delta} \right), \quad (2.25)$$

которая, как можно легко увидеть, является фурье-образом запаздывающей функции Грина

$$F_k^r(\tau) = \begin{cases} -i \langle \Psi_0 | [\rho_k(\tau), \rho_{-k}(0)] | \Psi_0 \rangle, & \tau > 0, \\ 0 & \tau < 0, \end{cases} \quad (2.26)$$

где операторы и точные волновые функции определены, как и раньше, в представлении Гейзенберга. Чтобы перейти от (2.25) к (2.26), надо использовать соотношение

$$F_k^r(\tau) = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F^r(k\omega) e^{-i\omega\tau} = \\ = -i \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 (e^{-i\omega_{n0}\tau} - e^{i\omega_{n0}\tau}), & \tau > 0, \\ 0 & \tau < 0. \end{cases} \quad (2.27)$$

Функцию $F^r(k\omega)$ можно легко записать в представлении Лемана, если ввести спектральную функцию

$$S(k\omega) = \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (2.28)$$

Тогда непосредственно из выражения (2.25) имеем

$$F^r(k\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S(k\omega') \left(\frac{1}{\omega - \omega' + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\delta} \right). \quad (2.29)$$

Из выражения (2.29) видно, что функция $F^r(k\omega)$ аналитична в верхней полуплоскости; это не должно вызывать удивления, так как мы выбрали причинное граничное условие, которое гарантирует, что функция реакции системы $F_k(t)$ зависит с самого начала от

поведения управляющей функции — внешнего воздействия $r_k(t)$. В силу этого свойства имеем

$$\int_C d\omega' \frac{F^r(k\omega')}{\omega - \omega'} = 0,$$

где контур C в ω' -плоскости выбран так, как показано на фиг. 7. Вклад от полуokrуга BDA равен нулю. Вклад от интегрирования по AB можно записать в виде

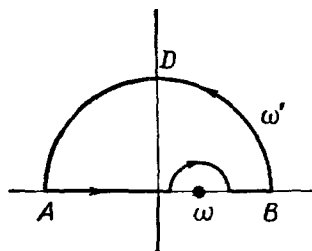
$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' F^r(k\omega') \left[P \frac{1}{\omega - \omega'} - i\pi\delta(\omega - \omega') \right] = 0,$$

так что имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' F^r(k\omega') P \frac{1}{\omega - \omega'} = i\pi F^r(k\omega). \quad (2.30)$$

Рассматривая действительную и мнимую части (2.30), мы приходим к дисперсионным соотношениям Крамерса—Кронига.

Описанная выше процедура лишь немного обобщает прием Нозьера и Пайнса [13], использованный для введения запаздывающей диэлектрической проницаемости свободного электронного газа. Чтобы установить между ними связь, положим, что $r_k(t)$ соответствует слабому пробному заряду, а V_k является фурье-образом кулоновского взаимодействия. Диэлектрическая проницаемость $\epsilon(k\omega)$ вводится с помощью преобразований Фурье по координатам и времени макро-



Фиг. 7.

скопических уравнений Пуассона

$$\begin{aligned} \operatorname{div} D(k\omega) &= \epsilon(k\omega) \operatorname{div} E(k\omega) = 4\pi r(k\omega), \\ \operatorname{div} E(k\omega) &= 4\pi [r(k\omega) - c \langle \rho(k\omega) \rangle]. \end{aligned} \quad (2.31)$$

В наших обозначениях получаем

$$\frac{1}{\varepsilon(k\omega)} - 1 = \frac{\langle \rho_{k\omega}(t) \rangle}{r_k e^{-i\omega t}} = \frac{4\pi e^2}{k^2} F^r(k\omega). \quad (2.32a)$$

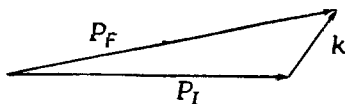
Если от обеих частей (2.32a) взять мнимую часть и использовать выражение (2.29), то получится следующее полезное соотношение:

$$\text{Im} \frac{1}{\varepsilon(k\omega)} = \frac{4\pi^2 e^2}{k^2} S(k\omega). \quad (2.32b)$$

Мы видим, что свойства величины $1/\varepsilon(k\omega)$ целиком определяются свойствами полученной выше функции $F^r(k\omega)$.

Свойства и физический смысл $S(k\omega)$

Мы впервые встретились со спектральной функцией $S(k\omega)$ в главе 1, где показали, что она измеряется непосредственно в экспериментах по неупругому рассеянию, для которого применимо борновское приближение. В частности, для частицы с массой M и начальным импульсом P_I , рассеянной в состоянии с импульсом P_F (при этом энергия частицы изменяется в интервале ω , $\omega + d\omega$, а угол рассеяния заключен между значениями θ и $\theta + d\theta$), имеем



Фиг. 8.

$$\frac{d^2\sigma}{d\theta d\omega} = \frac{M^2}{8\pi^3} \frac{P_F}{P_I} V_k^2 S(k\omega). \quad (2.33a)$$

Изменение энергии частицы ω связано с изменением импульса и углом рассеяния соотношением

$$\omega = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_I}{M} + \frac{k^2}{2M},$$

где \mathbf{P}_I , \mathbf{k} , \mathbf{P}_F показаны на фиг. 8.

Подытожим некоторые свойства функции $S(k\omega)$, следуя Ван Хову [55]:

1. Функция $2\pi S(k\omega)$ получается в результате преобразования Фурье по времени и пространству зави-

сящей от времени парной корреляционной функции $S(r\tau)$, которая определяется соотношением

$$S(r\tau) = \langle \Psi_0 | \rho(r\tau) \rho(00) | \Psi_0 \rangle,$$

где $\rho(r\tau)$ — оператор плотности в представлении Гейзенберга.

2. Структурный фактор $S(k)$ связан с функцией $S(k\omega)$ соотношениями

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(k\omega) = S(k) N, \quad (2.34)$$

$$S(k) = \langle \Psi_0 | \rho_k^+ \rho_k | \Psi_0 \rangle \cdot \frac{1}{N}, \quad (2.35)$$

и представляет собой фурье-образ, не зависящий от времени парной функции распределения

$$\rho(r) = \langle \Psi_0 | \rho(r) \rho(0) | \Psi_0 \rangle. \quad (2.36)$$

Заметим, что $S(k)$ измеряется непосредственно в эксперименте по определению дифференциального сечения рассеяния, которое далее интегрируется по всем значениям ω :

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \int_0^{\infty} d\omega \frac{d^2\sigma}{d\theta d\omega} = \frac{M^2}{8\pi^3} \frac{P_F}{P_I} V_k^2 S(k). \quad (2.336)$$

3. Функция $S(k\omega)$ подчиняется нормировочному соотношению

$$\int_0^{\infty} d\omega S(k\omega) \omega = \frac{Nk^2}{2m}, \quad (2.37)$$

где m — масса частиц системы. Чтобы получить это соотношение, заметим, что из определения функции $S(k\omega)$, (2.28), следует

$$\int_0^{\infty} d\omega S(k\omega) \omega = \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \omega_{n0}.$$

Непосредственное вычисление величины $\langle \Psi_0 | \rho_k [\rho_{-k}, H] | \Psi_0 \rangle$ для системы, которая инвариантна по отноше-

нию к отражению пространственных осей и взаимодействию в которой не зависит от скорости, приводит нас к соотношению

$$\sum_n \frac{2m}{k^2} \omega_{n0} |(\rho_k)_{n0}|^2 = \sum_n f_{0n} = N. \quad (2.38)$$

Из него следует формула (2.37). Соотношение (2.38) часто называют правилом f -суммы; оно является обобщением нормировочного соотношения Томаса — Райха — Куна на частный случай продольных колебаний и очень полезно при изучении электронного газа (Нозьер и Пайнс [13]).

Коллективные возбуждения

Как мы уже упоминали, коллективные возбуждения могут проявиться в структуре функции $S(k\omega)$. Интуитивно очевидно, что они будут проявляться в виде вполне определенных элементарных возбуждений, если только $S(k\omega)$ резко возрастает в области резонансного значения частоты $\omega(k)$, ширина которой $\Gamma_k \ll \omega(k)$, так как в этом случае действительно будет наблюдаться резкий пик на кривой, описывающей неупругое рассеяние частиц. Таким образом, с помощью измерения углового распределения неупруго рассеянных частиц можно непосредственно из экспериментальных данных определить $\omega(k)$.

Чтобы сделать наше рассмотрение аналогичным приведенному выше, введем функцию Грина колебаний плотности

$$F_k(\tau) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \rho_k(\tau) \rho_k^\dagger(0) \} | \Psi_0 \rangle, \quad (2.39)$$

фурье-образ которой и представление Лемана соответственно имеют вид

$$F(k\omega) = \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} - i\delta} \right), \quad (2.40)$$

$$F(k\omega) = \int_0^\infty d\omega' S(k\omega') \left(\frac{1}{\omega - \omega' + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega' - i\delta} \right). \quad (2.41)$$

Предположим теперь, что

$$S(k\omega') = S(k) \delta[\omega' - \omega(k)],$$

т. е. что имеется только одно возбуждение колебаний плотности с частотой $\omega(k)$. Тогда находим

$$F(k\omega) = S(k) \left(\frac{1}{\omega - \omega(k) + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega(k) - i\delta} \right). \quad (2.42)$$

Уравнение (2.42) описывает распространение кванта поля, связанного с $\rho(r, t)$, т. е. с возбуждением колебаний плотности.

Чтобы показать это, рассмотрим отдельно функцию Грина, например, для координаты фононного поля $\varphi(r, t)$:

$$D(r, \tau) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \varphi^+(r, \tau) \varphi(r, 0) \} | \Psi_0 \rangle \quad (2.43)$$

и ее фурье-образ

$$D_k(\tau) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \varphi_k^+(\tau) \varphi_k(0) \} | \Psi_0 \rangle. \quad (2.44)$$

Сравнивая (2.44) с (2.39), мы видим, что для $D_k(\tau)$ можно непосредственно написать фурье-образ

$$D(k\omega) = \sum_n (\varphi_k)_{n0}^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} - i\delta} \right) \quad (2.45)$$

и представление Лемана

$$D(k\omega) = \int_0^\infty d\omega' \varphi(k\omega') \left(\frac{1}{\omega - \omega' + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega' - i\delta} \right). \quad (2.46)$$

Наконец, в отличие от ρ_k величины φ_k всегда можно представить с помощью операторов рождения и уничтожения

$$\varphi_k = \alpha_k (b_k + b_{-k}^+), \quad (2.47)$$

где α_k — константа. Подставляя (2.47) в (2.45) (или с помощью непосредственных вычислений), находим

функцию Грина, характеризующую систему невзаимодействующих фононов:

$$D_0(k\omega) = \alpha_k^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_k^0 + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_k^0 - i\delta} \right), \quad (2.48)$$

где ω_k^0 — частота свободного фонона.

Сравнивая (2.48) и (2.42), мы видим, что если $S(k\omega)$ обладает сингулярностью типа δ -функции, то колебание ρ_k характеризуется фиксированной частотой $\omega(k)$ и распространяется без затухания, точно так же, как если бы это были звуковые волны [к тому же заключению можно, конечно, прийти более прямым путем, исходя из самого определения функции $S(k\omega)$]. Более того, мы можем теперь использовать по отношению к $F(k, \omega)$ и $F(k, \tau)$ те же самые соображения, которые привели нас к понятию квазичастиц. Мы считаем, что если $S(k\omega)$ обладает ярко выраженным пиком в окрестности некоторой частоты $\omega(k)$, то введение понятия слабозатухающего коллективного возбуждения фононного типа вполне оправдано и целесообразно. Так, например, для $\tau > 0$ энергия и время жизни коллективного возбуждения определяются тем полюсом аналитического продолжения $F(k\omega)$, лежащим под действительной ω -осью, который расположен к ней ближе других.

Функция $F_k(\tau)$ довольно просто связана с обычной двухчастичной функцией Грина, которую мы введем несколько позже. Заметим пока, что существует непосредственная связь между $F_k(\tau)$ и $F_k^*(\tau)$ и что, зная их аналитические свойства, легко перейти от одной к другой. Действительно, сравнивая (2.25) и (2.40), получаем, что действительные части этих двух функций совпадают. Более того, так как $\omega_{\tau 0} \geq 0$, то для $\omega > 0$ мнимые части этих функций также совпадают, а для $\omega < 0$ отличаются знаками. Итак, мы имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} F(k\omega) &= \operatorname{Re} F^*(k\omega), \\ \operatorname{Im} F(k\omega) &= \operatorname{Im} F^*(k\omega), & \omega > 0, \\ \operatorname{Im} F(k\omega) &= -\operatorname{Im} F^*(k\omega), & \omega < 0. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Заметим далее, что в вычислениях с помощью теории возмущений диэлектрическую проницаемость, естественно, определить согласно соотношению

$$\frac{1}{\epsilon_p(k\omega)} - 1 = \frac{4\pi e^2}{k^2} F(k\omega). \quad (2.50)$$

Связь $\epsilon_p(k\omega)$ и $\epsilon(k\omega)$ немедленно устанавливается с помощью (2.49).

Наконец, обсудим связь между данным нами определением коллективных возбуждений и определением их с помощью требования:

$$\epsilon(k\omega) = 0, \quad (2.51)$$

естественного для электронного газа. Условие (2.51) соответствует случаю, когда в системе может существовать отличное от нуля электрическое поле и колебания заряда в отсутствие любого внешнего воздействия [см. (2.31)], и поэтому оно описывает свободные резонансные, или коллективные возбуждения в системе. Однако из (2.32) следует, что условие равенства нулю $\epsilon(k\omega)$ равносильно требованию существования соответствующего полюса в выражениях для $F_r(k\omega)$ или $F(k\omega)$.

§ 4. ДВУХЧАСТИЧНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Двухчастичные функции Грина определяются аналогично одночастичным функциям Грина (2.1):

$$K(12; 34) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \Psi(1) \Psi^+(2) \Psi(3) \Psi^+(4) \} | \Psi_0 \rangle,$$

где пространственные и временные аргументы для каждого оператора волнового поля, записанного в представлении Гейзенберга, обозначены цифрами 1, 2, 3 и 4. Галицкий и Мигдал [3], обсудив разложение $K(12; 34)$, написали интегральное уравнение, которому должна удовлетворять функция Грина K . В этом параграфе я хочу только указать, каким путем функцию $K(12; 34)$ можно свести к функции Грина колебаний плотности. Если приравнять пространственные переменные в $\Psi(1)$ и $\Psi^+(2)$, а время 2 считать меньшим, но бесконечно мало отличающимся от

времени 1 (такую предельную процедуру будем обозначать: $2 = 1^+$), а в отношении переменных 4 и 3 предположить то же самое (т. е. считать $4 = 3^+$), то получим

$$K(11^+; 33^+) = -i \langle \Psi_0 | T [\rho(1) \rho(3)] | \Psi_0 \rangle.$$

Для однородной системы величина $K(11^+; 33^+)$ зависит только от разности координат и времен 1 и 3, и для нее существует фурье-образ $F(k\omega)$. Таким образом, рассматриваемые нами коллективные возбуждения проявляются как полюса двухчастичной функции Грина в предельном случае, когда она описывает распространение комплекса, состоящего из дырки и частицы.

§ 5 ТЕОРЕМЫ ОБ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Рассмотрим исходный гамильтониан системы N взаимодействующих фермионов ($v_k = V_k/\Omega$)

$$H = \sum_p \varepsilon(p) C_p^+ C_p + \sum_{pqk} \frac{v_k}{2} C_{p+k}^- C_{q-k}^+ C_q C_p. \quad (2.52)$$

Выражая потенциальную энергию с помощью колебаний плотности ρ_k , можно переписать это выражение в виде

$$H = \sum_p \varepsilon(p) C_p^+ C_p + \sum_k \frac{v_k}{2} (\rho_k^+ \rho_k - N). \quad (2.53)$$

Не воспроизводя детального доказательства, укажем два различных выражения для энергии основного состояния системы E_0 . Первое выражение предложено Галицким и Мигдалом [3]:

$$E_0 = \frac{1}{2\pi i} \int_C d\varepsilon \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left(\varepsilon + \frac{p^2}{2} \right) G(p, \varepsilon), \quad (2.54)$$

где контур интегрирования C необходимо замыкать сверху действительной ε -оси.

Соотношение (2.54) можно непосредственно получить, вычисляя производную $(\partial/\partial\tau) G(p, \tau)$ для $\tau < 0$ и переходя к пределу $\tau \rightarrow 0^-$. В это выражение

включен множитель 2, необходимый для учета двух возможных спиновых состояний фермионов.

Для получения выражения второго типа для энергии основного состояния нужно прежде всего найти простое выражение для энергии взаимодействия

$$E_{\text{int}} = \langle \Psi_0 | \sum_k [v_k (\rho_k^+ \rho_k - N)/2] | \Psi_0 \rangle. \quad (2.55)$$

Используя (2.35), (2.34) и полученное с их помощью соотношение

$$S(k\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F^r(k\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F(k\omega), \quad \omega > 0, \quad (2.56)$$

мы можем записать

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \sum_k \frac{v_k}{2} N [S(k) - 1] = \\ &= -\sum_k \frac{v_k}{2} \left[\int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} F^r(k\omega) - N \right] = \\ &= \sum_k \frac{v_k}{2} \left[\int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im} F(k\omega) - N \right]. \end{aligned} \quad (2.57)$$

Для случая электронного газа выражение (2.57) принимает особенно простой вид (Нозьер и Пайнс [13]):

$$E_{\text{int}} = -\sum_k \left\{ \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(k\omega)} - \frac{2\pi n e^2}{k^2} \right\}. \quad (2.58)$$

В качестве следующего шага используем возможность прямого перехода от E_{int} к E_0 , при котором E_{int} рассматривается как функция изменяющейся константы связи α . Этот прием, предложенный впервые, по-видимому, Паули и неоднократно использовавшийся с тех пор многими исследователями (Фейнман, Савада и др.), приводит к выражению

$$E_0 = E(0) + \int_0^g \frac{d\alpha}{\alpha} E_{\text{int}}(\alpha), \quad (2.59)$$

где g — действительная константа связи, входящая в потенциал V_h . Таким образом, мы можем определить энергию основного состояния, если известна функция $S(k\omega)$ для всех произвольных констант связи. Выражение (2.59) оказывается удобным в тех приложениях, когда вычислить $S(k\omega)$ в данном приближении более просто, чем определить величину $G(p\epsilon)$; иногда мы встречаемся с обратным положением.

§ 6. МЕТОД УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

Метод уравнений движения используется для определения спектра возбуждений и основного состояния системы; для этого цепочка операторных квантовых уравнений движения исследуется в самосогласованном приближении (Савада и др. [8], Андерсон [32], Зул и Вертхаммер [53], Савада и Фукуда [52]). Изложим обычную схему метода.

1. Будем считать, что волновая функция основного состояния Ψ_0 известна.

2. Найдем операторы рождения O_p^+ и уничтожения O_p элементарных возбуждений системы, требуя, чтобы они удовлетворяли уравнениям движения для осцилляторов:

$$[H, O_p^+] = \omega_p O_p^+, \quad (2.60a)$$

$$[H, O_p] = -\omega_p O_p. \quad (2.60b)$$

3. Результат действия оператора O_p^+ на функцию Ψ_0 соответствует возбужденному состоянию с энергией ω_p . Аналогичным образом должны иметь

$$O_p \Psi_0 = 0, \quad (2.61)$$

если Ψ_0 — волновая функция основного состояния. Таким образом, условие (2.61) можно использовать как определение Ψ_0 .

4. Раз ω_p и Ψ_0 определены, то другие свойства системы (энергия основного состояния и т. д.) могут быть найдены каким-либо способом более или менее непосредственно.

Чтобы лучше оценить этот метод, приведем несколько простых примеров. Сначала исследуем возбуждения квазичастиц, полагая, что можно взять в

качестве O_p оператор уничтожения электрона C_p . Добавим к гамильтониану (2.52) слагаемое $-\mu N$ (где μ — химический потенциал, или, что эквивалентно, энергия частицы на поверхности Ферми):

$$H' = H - \mu N = \sum_{p\sigma} [\varepsilon(p) - \mu] C_{p\sigma}^+ C_{p\sigma} + \sum_{\substack{pqk \\ \sigma\sigma'}} \frac{v_k}{2} C_{p+k\sigma}^+ C_{q-k\sigma}^+ C_{q\sigma'} C_{p\sigma}. \quad (2.62)$$

Уравнение движения, которому удовлетворяет C_p^+ , имеет вид

$$[H', C_p^+] = [\varepsilon(p) - \mu] C_p^+ + \sum_{kq\sigma'} v_k C_{p+k}^+ C_{q-k}^+ C_q. \quad (2.63)$$

Таким образом, оператор рождения одночастичного возбуждения связан с тернарным оператором — оператором рождения частицы и пары частица — дырка. Последнее выражение полезно переписать, выделяя те части тернарного оператора, которые содержат оператор C_p^+ , т. е. члены с $k = 0$ и $k = q - p$:

$$[H', C_p^+] = [\varepsilon(p) - \mu + nV_0 - \sum_q v_{q-p} N_q] C_p^+ - \sum_q v_{q-p} [C_q^+ C_q - N_q] C_p^+ - \sum_{\substack{k \neq 0 \\ k \neq q-p}} v_k C_{p+k}^+ C_{q-k}^+ C_q. \quad (2.64)$$

Мы можем теперь линеаризовать уравнения движения, пренебрегая в правой части (2.64) вторым флуктуационным и тернарным членами. Тогда получим

$$(H', C_p^+) = [\tilde{\varepsilon}(p) - \mu] C_p^+, \quad (2.65)$$

где $\tilde{\varepsilon}(p)$ — энергия возбуждения квазичастиц, определяется выражением

$$\tilde{\varepsilon}(p) = \varepsilon(p) + nV_0 - \sum_q v_{q-p} N_q. \quad (2.66)$$

Аналогичным образом имеем

$$(H', C_p) = -[\tilde{\varepsilon}(p) - \mu] C_p. \quad (2.67)$$

Уравнения (2.66) и (2.67) непосредственно определяют волновую функцию основного состояния. Эти уравнения совместны только при условии, если функция Ψ_0 обладает свойствами:

$$\begin{aligned} C_p^+ \Psi_0 &= 0, \quad \text{если } \varepsilon(p) < \mu, \\ C_p \Psi_0 &= 0, \quad \text{если } \varepsilon(p) > \mu. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Следовательно,

$$\Psi_0 = \prod_{\substack{p, \sigma \\ \varepsilon(p) < \mu}} C_{p\sigma}^+ |0\rangle, \quad (2.69)$$

где $|0\rangle$ — функция вакуумного состояния. Граничное значение импульса p_F можно определить из условия $N = \sum_p N_p$, причем

$$\mu = \varepsilon(p_F). \quad (2.70)$$

Наконец, энергию основного состояния можно получить, исходя из формулы

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N}. \quad (2.71)$$

Таким образом мы находим

$$\frac{E_0}{N} = \frac{3p_F^2}{10m} + \frac{1}{2} n V_0 - \frac{1}{2N} \sum_{pq} v_q N_q N_{q-p}. \quad (2.72)$$

Заметим, что N_q берется в виде невозмущенной функции распределения частиц.

Полученные таким способом результаты представляют собой, конечно, приближение Хартри — Фока. Первый член в поправке к энергии квазичастицы в выражении (2.66) — результат прямого взаимодействия (член Хартри), второй — обменный член (член Хартри — Фока).

Допустим, что мы хотим получить более высокое приближение, нежели приближение Хартри — Фока. Зул и Вертхамер [53] показали, что поправки, возникающие при учете отброшенного нами флуктуацион-

ного члена, имеют порядок $N^{-1/2}$ и поэтому для системы с большим числом частиц ими можно пренебречь. Далее, нужно записать уравнение движения для тернарного члена; в правой части этого уравнения будут содержаться члены, пропорциональные C_p^+ , а также тернарные и квинтарные члены. Если пренебречь, например, квинтарными членами, то получим систему линейных уравнений, которая содержит только линейные и тернарные члены и которую можно затем решить. Зул и Вертхамер провели такое исследование для электронного газа и показали, что оно приводит к тем же результатам, что и теория возмущений. За дальнейшими подробностями мы отсылаем читателя к оригинальной работе [53].

Такой же метод можно применить к приближенному вычислению возбуждений колебаний плотности (Бом и Пайнс [4]). Рассмотрим уравнение движения для $C_{p+k}^+ C_p$, оператора рождения пары частица — дырка. Получим

$$\begin{aligned}
 [H', C_{p+k}^+ C_p] = & [\varepsilon(p+k) - \varepsilon(p)] C_{p+k}^+ C_p - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{k'} v_{k'} [(C_{p+k}^+ C_{p+k'} - C_{p+k-k'}^+ C_p) \rho_k^+ + \\
 & + \rho_k^+ (C_{p+k}^+ C_{p+k'} - C_{p+k-k'}^+ C_p)]. \quad (2.73)
 \end{aligned}$$

Если в этом выражении пренебречь членами взаимодействия, то мы найдем, что пара дырка — частица совершает колебания с частотой

$$\omega(kp) = \varepsilon(p+k) - \varepsilon(p).$$

Такое приближение соответствует приближению свободного движения частиц, или приближению Хартри — Фока, в котором спектр колебаний плотности включает только пары электрон — дырка в диапазоне энергий от нуля (или $\frac{kp_F}{m} - \frac{k^2}{2m}$) до $\frac{kp_F}{m} + \frac{k^2}{2m}$. Этот спектр рассматривался ранее (см. фиг. 1).

При линеаризации уравнения движения можно все-таки учесть некоторые эффекты взаимодействия. Особенно простой результат получим в случае при-

ближения хаотических фаз: при определении движения пары в состоянии с импульсом k учитывается только тот член взаимодействия частиц, который связан с импульсом передачи, равным k . В этом случае (2.73) сводится к уравнению

$$H', C_{p+k}^+ C_p] = [\varepsilon(p+k) - \varepsilon(p)] C_{p+k}^+ C_p - \\ - v_k (N_{p+k} - N_p) \sum_q C_{q+k}^+ C_q. \quad (2.74)$$

Полученное уравнение обладает гармоническими решениями с частотой ω_k ; дисперсионное соотношение можно найти, приравняв правую часть этого уравнения величине $\omega_k C_{p+k}^+ C_p$:

$$1 = v_k \sum_p \frac{N_p - N_{p+k}}{\omega_k - \varepsilon(p+k) + \varepsilon(p)}. \quad (2.75)$$

Уравнение (2.75) имеет два типа решения. Первый тип соответствует

$$\omega_k = \varepsilon(p+k) - \varepsilon(k)$$

[трудность, связанную с полюсом, легко устранить, если считать, что ω_k имеет небольшую мнимую часть, соответствующую запаздывающему решению (2.75)]. Таким образом, пары частица — дырка продолжают в приближении хаотических фаз оставаться возможным возбуждением. Второй тип решения смещен от непрерывного спектра возбуждений пар частица — дырка при достаточно больших длинах волн, причем величина этого смещения зависит от значения V_k . Это решение соответствует коллективным возбуждениям; в случае кулоновского взаимодействия

$$V_k = \frac{4\pi e^2}{k^2},$$

и уравнение (2.75) представляет собой дисперсионное соотношение для плазмонов в приближении хаотических фаз. Для разреженного ферми-газа мы также приходим к уравнению (2.75) для спектра коллективных возбуждений, при этом V_k заменяется на $m^{-1}f_0$, где f_0 — длина рассеяния. В этом случае (2.75)

представляет собой дисперсионное соотношение для нулевого звука.

Рассмотренные примеры свидетельствуют о ценности метода уравнений движения. В дальнейшем мы увидим, что с помощью этого метода можно довольно просто получить решение Бардина — Купера — Шриффера для случая сил притяжения; метод оказывается также эффективным и при определении коллективных возбуждений в сверхпроводниках, ядерной материи, конечных ядрах и при исследовании задач, связанных с вопросами устойчивости. Я уверен поэтому, что метод уравнений движения должен быть принят на «вооружение» всеми физиками, интересующимися проблемой многих тел. Метод, однако, не безупречен. Выходя за пределы приближения Хартри — Фока (при изучении движения частицы) или приближения хаотических фаз (при изучении движения частицы — дырки), приходится заботиться о том, чтобы члены высших порядков рассматривались последовательно (см. обсуждение этого вопроса в работе Зула и Вертхамера [53]). Вполне возможно, что, когда в дальнейшем физики будут теснее связаны с этим методом, отыщется набор простых рецептов для работы с указанными членами; во всяком случае этот метод, вероятно, будут использовать шире, чем теорию возмущений на той стадии, на которой мы ее теперь имеем.

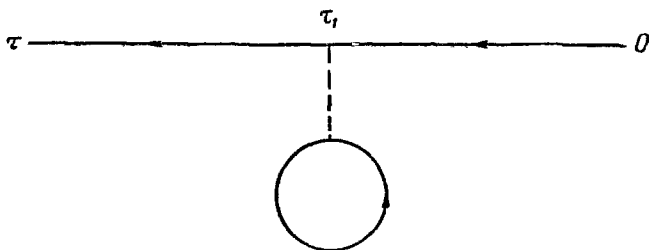
§ 7. ВРЕМЕННАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Применение диаграмм Фейнмана

Вычисления с помощью теории возмущений, основанные на использовании диаграмм Фейнмана, разработаны для энергии основного состояния (Голдстоун [1], Хаббард [2]), для одночастичной функции Грина (Галицкий [18], Дюбуа [39]) и для динамической диэлектрической проницаемости (Хаббард [2], Дюбуа [60]). Почти во всех этих работах довольно подробно выводится и обсуждается как разложение в ряд S -матрицы, так и правила подсчета вкладов от

соответствующих диаграмм, поэтому мне кажется целесообразным не воспроизводить здесь эти выкладки. Мне хочется лишь передать основной физический смысл диаграмм. Поэтому я дам сводку основных правил и продемонстрирую целесообразность их применения на простых примерах.

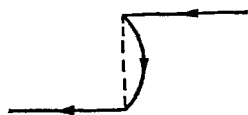
При определении $G(r\tau)$ мы имеем дело с движением одной частицы. При отсутствии взаимодействия



Фиг. 9.

мы можем представлять такое движение прямой линией, проведенной справа налево: $\tau \leftarrow 0$. Так как невозмущенным состоянием является заполненная сфера Ферми, то существует возможность также для движения дырки, которое будет представляться линией, проведенной слева направо: $-\tau \rightarrow 0$. Такое обозначение совместимо с результатами, полученными для $G_0(r\tau)$, и поэтому линию можно рассматривать как эквивалент $G_0(r\tau)$. Учет взаимодействия частицы, например рассеяние ее на других частицах системы, приводит к видоизменению $G_0(r\tau)$. Эти взаимодействия описываются той частью гамильтониана (2.52), каждое слагаемое которой соответствует рассеянию одной частицы на другой. В первом порядке теории возмущений вклад в $G(r\tau)$ дают два рода процессов. Первый изображается на фиг. 9. Частица движется как свободная до тех пор, пока она не испытывает прямого рассеяния на частицах фона в момент времени τ_1 ; затем она вновь движется как свободная от момента времени τ_1 до τ . Акт взаимодействия представлен пунктирной линией, круг соответствует опи-

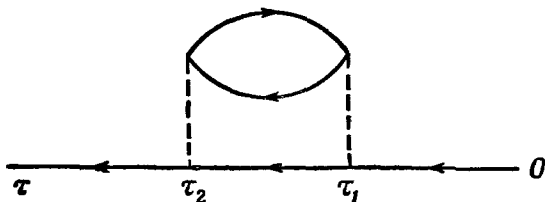
санию процесса, при котором частица фона была выбита из состояния с данным импульсом, а затем возвратилась в это состояние снова. Второй процесс показан на фиг. 10 и соответствует частице, претерпевающей обменное рассеяние на частицах фона.



Фиг. 10.

Во втором порядке на движение частицы влияет целый ряд процессов рассеяния. Это может быть двойное необменное рассеяние, двойное обменное

рассеяние или прямое рассеяние плюс обменное рассеяние. Возможен случай, показанный на фиг. 11. В момент τ_1 наша частица рассеивается на частице фона, изменяя состояние последней. Это соответствует



Фиг. 11.

рождению пары частица — дырка. В момент τ_2 частица рассеивается опять и при этом пара аннигилирует; в результате этого частица фона возвращается в первоначальное состояние. Этот процесс соответствует поляризации частиц фона.

Для $G(r\tau)$, учитывая все имеющие место процессы рассеяния, можно построить ряд теории возмущений. Это проще всего сделать, если вычертить последовательность диаграмм, в которых частица входит справа, претерпевает все (топологически неэквивалентные) взаимодействия и выходит слева, и если знать правила подсчета вклада от каждой такой диаграммы. Можно показать, что существует взаимно однозначное соответствие между членами ряда теории возмущений для $G(r\tau)$ и этими диаграммами. Правила подсчета вкладов от диаграмм можно дать в со

ответствии с движением в пространстве — времени, которое мы рассматривали, или относительно $G(p\epsilon)$, являющейся фурье-образом $G(r, \tau)$. Фурье-образы более удобны для большинства приближений. Там, где используются эти правила, стрелки больше не означают направления изменения времени, а просто показывают, что энергия и импульс сохраняются в каждой вершинной части диаграммы.

Правила диаграмм в импульсно-энергетическом пространстве заключаются в следующем:

1. Каждой прямой сплошной линии приписывается значение импульса и энергии; каждой сплошной линии с импульсом p и энергией ϵ соответствует множитель

$$iG_0(p, \epsilon) = i[\epsilon - \epsilon(p) + i\delta_p]^{-1}.$$

2. Каждому взаимодействию (представленному пунктирной линией) сопоставляется множитель $-iV_q$, если взаимодействие мгновенное и локальное, и $-iV(q\omega)$ в других случаях.

3. В каждой вершинной части диаграммы сохраняется энергия и импульс при условии, что величины, приписанные линиям, направленным к вершинной части, берутся со знаком «+», а величины, приписанные линиям, направленным от нее, — со знаком «—».

4. По каждой свободной переменной p и ϵ в диаграмме необходимо выполнить интегрирование

$$\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3p \int d\epsilon.$$

5. Каждой замкнутой внутренней петле сопоставляется множитель (-1) .

6. При суммировании по спинам вводится множитель 2

7. Специальное правило существует для нераспространяющихся элементов, типа показанных на фиг. 9 и 10: каждой такой линии с импульсом p соответствует множитель $-N_p$.

Несколько простых примеров

Проиллюстрируем изложенные правила на примерах тех диаграмм, которые мы до сих пор рассматривали.

1. Необменное, прямое рассеяние на частицах фона (см. фиг. 9)

$$A = i^2 G_0(p, \varepsilon) G_0(p, \varepsilon) (-iV_0) \left[-\frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3p' (-N_{p'}) \right],$$

$$\frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3p' N_{p'} = N.$$

Таким образом, замкнутая петля дает вклад, пропорциональный N .

2. Обменное рассеяние на частицах фона (см. фиг. 10)

$$B = i^2 G_0(p, \varepsilon) G_0(p, \varepsilon) \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q (-iV_q) (-N_{p+q}).$$

3. Поляризация фона (см. фиг. 11)

$$C = [iG_0(p, \varepsilon)]^2 \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3q \int d\omega [iG_0(p-q, \varepsilon-\omega)] \times$$

$$\times (-iV_q)^2 [-i\pi_0(q\omega)],$$

где введенной поляризационной диаграмме первого порядка сопоставляется множитель $-i\pi_0(q\omega)$, определяемый выражением

$$-i\pi_0(q\omega) = 2(-i)(-1) \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^4} \int d\varepsilon' (i)^2 \times$$

$$\times \left[\frac{1}{\varepsilon' + \omega - \varepsilon(p' + q) + i\delta_{p'+q}} \frac{1}{\varepsilon' - \varepsilon(p') + i\delta_{p'}} \right].$$

Поучительно подсчитать величину $\pi_0(q, \omega)$. Рассматривая отдельно области $p' > p_F$ и $p' < p_F$, произведем прежде всего интегрирование по ε' . Если $p' > p_F$, мы получим вклад в интеграл только при условии $|p' + q| < p_F$; если и $p' > p_F$ и $|p' + q| > p_F$, то сингулярности в обоих знаменателях в комплексной ε' -плоскости будут лежать ниже действительной оси, и поэтому, замыкая контур над действительной осью,

после интегрирования получим нуль. Для $p' > p_F$, $|p' + q| < p_F$ получаем следующий вклад:

$$\int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon' + \omega - \varepsilon(p' + q) - i\delta} \frac{1}{\varepsilon' - \varepsilon(p') + i\delta} =$$

$$= \frac{-i}{\varepsilon(p') - \varepsilon(p' + q) + \omega - i\delta}.$$

Таким же способом, рассматривая $p' < p_F$, видим, что в случае $|p' + q| > p_F$ после интегрирования по ε' получаем

$$\int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon' + \omega - \varepsilon(p' + q) + i\delta} \frac{1}{\varepsilon' - \varepsilon(p') - i\delta} =$$

$$= \frac{i}{\varepsilon(p') - \varepsilon(p' + q) + \omega + i\delta}.$$

Поэтому имеем

$$\pi_0(q\omega) = \frac{2}{(2\pi)^3} \left[\int_{\substack{p' < p_F \\ |p' + q| > p_F}} d^3p' \frac{1}{\varepsilon(p') - \varepsilon(p' + q) + \omega + i\delta} - \right.$$

$$\left. - \int_{\substack{p' > p_F \\ |p' + q| < p_F}} d^3p' \frac{1}{\varepsilon(p') - \varepsilon(p' + q) + \omega - i\delta} \right].$$

Это выражение можно записать более симметрично, если во втором интеграле произвести взаимную замену p' и $(p' + q)$. Тогда получим

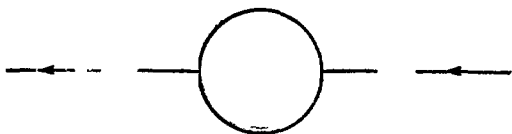
$$\pi_0(q\omega) = 2 \int_{\substack{p' < p_F \\ |p' + q| > p_F}} \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{\omega + \varepsilon(p') - \varepsilon(p' + q) + i\delta} - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\omega + \varepsilon(p' + q) - \varepsilon(p') - i\delta} \right]. \quad (2.76)$$

Массовый оператор и уравнение Дайсона

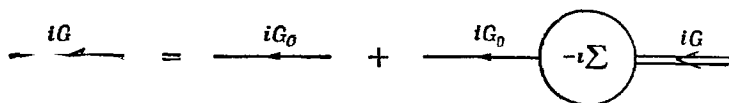
Рассматриваемые диаграммы имеют структуру собственно энергетических диаграмм, характеризующих видоизменение энергии $\varepsilon(p)$ движущейся частицы.

Они представляют собой класс диаграмм, в котором для получения одночастичной функции Грина необходимо присоединить одну линию справа и одну слева (фиг. 12). Простой способ суммирования бесконечного числа собственно энергетических диаграмм,



Фиг. 12.

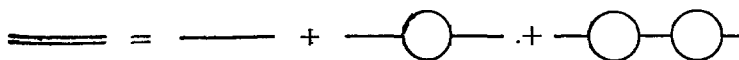
если известны вклады от простейших диаграмм, сводится к использованию интегрального уравнения, графически изображенного на фиг. 13, где двойная



Фиг. 13.

линия означает точную функцию Грина $iG(p, \epsilon)$, а круг представляет сумму всех неприводимых собственно энергетических диаграмм $-i\Sigma(p, \epsilon)$.

Производя итерации, убеждаемся, что таким путем можно просуммировать ряд для $G(p, \epsilon)$, приведенный на фиг. 14. Однако, чтобы не считать члены ряда



Фиг. 14.

теории возмущений дважды, необходимо определить неприводимую собственно энергетическую диаграмму, т. е. такую диаграмму, которая при разрыве одной линии не распадается на две части.

Уравнение Дайсона

$$G(p, \epsilon) = G_0(p, \epsilon) + G_0(p, \epsilon)\Sigma(p, \epsilon)G(p, \epsilon)$$

решается просто; в результате имеем

$$G(p, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon(p) - \Sigma(p, \epsilon) + i\delta_p}.$$

Мы видим, что оператор $\Sigma(p, \epsilon)$ в компактном виде описывает изменение, происходящее в распространении частицы в результате взаимодействия с другими фермионами. В общем случае эта величина состоит из действительной и мнимой частей. Энергия квазичастицы определяется как решение уравнения

$$\epsilon = \epsilon(p) + \Sigma(p, \epsilon),$$

которое может оказаться очень сложным.

Рассмотренные нами диаграммы имеют следующие собственно энергетические части:

$$\Sigma_A = NV_0,$$

$$\Sigma_B = - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q V_q N_{p+q},$$

$$[\Sigma_C = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3q \int d\omega (V_q)^2 \pi_0(q, \omega) G_0(p - q, \epsilon - \omega).$$

Заметим, что Σ_A и Σ_B , как это видно из (2.66), представляют собой вклады в энергию квазичастицы, соответствующие приближению Хартри и Хартри — Фока.

Поляризационные диаграммы и $\epsilon_p(k\omega)$

Аналогичный простой прием суммирования оказывается полезным и при изучении вопроса об изменении взаимодействия частиц, происходящего в результате поляризации среды. Мы можем определить величину $1/\epsilon_p(k\omega)$ как характеристику экранирования взаимодействия, если учтены все возможные процессы поляризации. Такое эффективное взаимодействие частиц изображено на фиг. 15. Бесконечный класс членов, дающих вклад в $\epsilon_p(k\omega)$, можно просуммировать простым способом, если записать уравнение

$$-\frac{iV_k}{\epsilon_p(k\omega)} = -iV_k + \{(-iV_k) [-i\pi(k\omega)] (-iV_k)\} \frac{1}{\epsilon_p(k\omega)},$$

графически изображенное на фиг. 16, где $-i\pi(k\omega)$ представляет собой сумму всех неприводимых поля-



Ф и г. 15.

ризационных диаграмм, т. е. таких, которые при разрыве одной линии взаимодействия не распадаются на

$$\frac{-iV_k}{\epsilon_p(k\omega)} = -iV_k + \text{diagram with a circle and a vertical dashed line through it, labeled } -i\pi(k\omega)$$

Ф и г. 16.

две поляризационные диаграммы. Это уравнение имеет простое решение:

$$\epsilon_p(k\omega) = 1 + V_k \pi(k\omega).$$

Ранее мы уже рассматривали величину $\pi_0(k\omega)$, представляющую собой вклад первого порядка в поляризационный оператор $\pi(k\omega)$.

КОНКРЕТНЫЕ ЗАДАЧИ

§ 1 ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ

1. Исходным гамильтонианом считается гамильтониан (2.52), в котором взаимодействие имеет вид

$$V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2},$$

а члены с $q = 0$, компенсирующие однородный фон положительного заряда, опущены. В связи с этим приближение Хартри приводит к тем же результатам, что и приближение свободного движения частиц; энергия основного состояния (в ридбергах) в обоих случаях имеет значение:

$$\frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon(p_F) = \frac{2,21}{r_s^2}, \quad (3.1)$$

т. е. представляет собой среднюю кинетическую энергию частиц в невозмущенной сфере Ферми.

2. В приближении Хартри — Фока принимаются во внимание корреляции электронов, обусловленные принципом Паули. В силу этого происходит разделение электронов с параллельными спинами на две не взаимодействующие группы, что уменьшает энергию основного состояния системы. Подсчитаем в качестве иллюстрации это уменьшение, известное под названием обменной энергии, с помощью уравнений (2.57) и (2.59), используя для среднего квадратичного

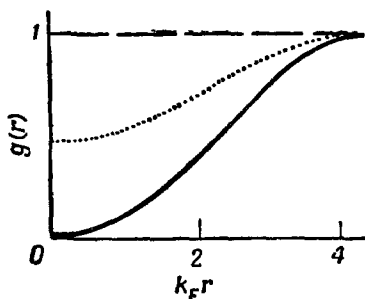
от компоненты плотности (2.35) приближение Хартри — Фока:

$$S(k)_{HF} = \sum_{p\sigma} \frac{N_{p\sigma} (1 - N_{p+k\sigma})}{N} = \begin{cases} \frac{3}{4} \frac{k}{k_F} - \frac{3}{48} \frac{k^3}{k_F^3}, & k < 2k_F, \\ 1, & k > 2k_F. \end{cases} \quad (3.2)$$

На каждую частицу приходится следующая обменная энергия (в ридбергах):

$$E_{\text{exch}} = \frac{E_{\text{int}}}{N} = \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} [S(k) - 1] = -\frac{0,916}{r_s}. \quad (3.3)$$

Таким образом, первая поправка к (3.1) за счет обменного взаимодействия пропорциональна e^2 . Из



Фиг. 17. Зависимость $g(r)$ от $k_F r$.

Пунктирная линия — приближение Хартри; точечная — Хартри — Фока; сплошная — приближение хаотических фаз.

(3.1) и (3.2) видно, что обменная энергия обусловливается уменьшением $S(k)$ при малых k . [Заметим, что в приближении Хартри $S(k) = 1$.] Поведение парной корреляционной функции $g(r)$ в приближении Хартри — Фока, связанной с $S(k)$ и $p(r)$ соотношением

$$g(r) = 1 + N^{-1} \int d^3k [S(k) - 1] e^{+ik \cdot r} = 1 + N^{-1} [p(r) - \delta(r)],$$

показано на фиг. 17. При $r = 0$ она равна $1/2$, это соответствует тому, что группы электронов с параллельными спинами независимы друг от друга.

3. Энергия квазичастиц в приближении Хартри — Фока проявляет в окрестности p_F логарифмическую расходимость:

$$\epsilon_{HF}(p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2 p_F}{2\pi} \left(2 + \frac{p_F^2 - p^2}{p p_F} \ln \left| \frac{p + p_F}{p - p_F} \right| \right). \quad (3.4)$$

В результате этого удельная теплоемкость, которая зависит от $(\partial / \partial p)_{F}$, резко изменяется и растет как $T / \ln T$. Этот результат противоречит экспериментальным данным. Причина этой трудности обусловлена дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия. Дальнейшие трудности того же происхождения, приводящие к расходящимся выражениям, возникают при попытке уточнить приближение Хартри — Фока с помощью рассмотрения второго порядка теории возмущений.

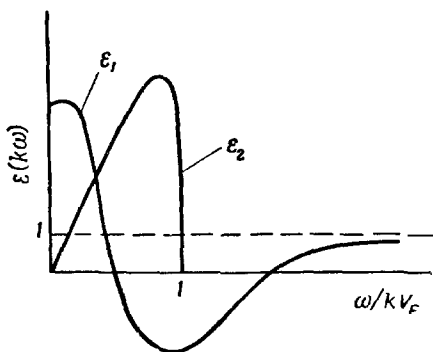
4. Указанные трудности преодолеваются в приближении хаотических фаз, в котором величины, характеризующие эффекты взаимодействия, зависящие от одного и того же импульса передачи k , можно просуммировать во всех порядках теории возмущений; с помощью этого приема получен сходящийся результат (Гелл-Манн и Бракнер [6, 7]). Например, ряд для диэлектрической проницаемости имеет вид

$$\frac{1}{\epsilon_{RPA}(k\omega)} = 1 - V_k \pi_0(k\omega) - [V_k \pi_0(k\omega)]^2 - [V_k \pi_0(k\omega)]^3 + \dots = \frac{1}{1 + V_k \pi_0(k\omega)}. \quad (3.5)$$

Первый член этого ряда соответствует приближению Хартри — Фока; второй член — вклад второго порядка от поляризационных диаграмм — приводит к расходящемуся результату для энергии основного состояния и энергий возбуждения квазичастиц; третий член приводит к еще более расходящимся выражениям и т. д. Суммирование с помощью процедуры Дайсона — Хаббарда (см. фиг. 16) приводит

к выражению для $\epsilon_p(k\omega)$, не имеющему особенностей. Сумму (3.5) можно получить непосредственно с помощью метода уравнений движения (добавляя к гамильтониану специальные члены) и многими другими приемами.

5. Характеристики системы можно рассчитать просто, если известна величина $\epsilon_{RPA}(k\omega)$ (Нозьер и Пайнс [13]). [Для положительных частот мы не делаем различия между запаздывающей и опережающей



Фиг. 18.

функцией $\epsilon(k\omega)$.] Используя (2.76) и (3.5), запишем $\epsilon(k\omega)$ в виде

$$\epsilon_{RPA}(k\omega) = \epsilon_1(k\omega) + i\epsilon_2(k\omega), \quad (3.6)$$

где

$$\epsilon_1(k\omega) = 1 + \frac{8\pi e^2}{k^2} \sum_p \frac{N_p [\epsilon(p-k) - \epsilon(p)]}{\omega^2 - [\epsilon(p-k) - \epsilon(p)]^2}, \quad (3.7)$$

$$\epsilon_2(k\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{k^2} \sum_p N_p [1 - N_{p+k}] \delta[\omega - \epsilon(p-k) - \epsilon(k)]. \quad (3.8)$$

График изменения ϵ_1 и ϵ_2 для больших длин волн приведен на фиг. 18.

Отметим следующие свойства $\epsilon_{RPA}(k\omega)$ при больших длинах волн:

а. При низких частотах и больших длинах волн

$$\epsilon_1(k\omega) \approx 1 + \frac{k_{FT}^2}{k^2},$$

где k_{FT} — волновой вектор экранирования модели Томаса — Ферми,

$$\frac{k_{FT}}{k_F} = \frac{\sqrt{3} \omega_p}{v_F k_F} = 0,82 r_s^{1/2}, \quad (3.9)$$

причем k_{FT}^{-1} — характерная длина экранирования в электронном газе; для электронной плотности, представляющей физический интерес, она порядка расстояния между частицами.

б. Мнимая часть проницаемости:

$$\epsilon_2 = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \frac{k_{FT}^2}{k^2} \frac{\omega}{kv_F}, & \omega \leq kv_F, \\ 0, & \omega \geq kv_F. \end{cases} \quad (3.10)$$

Таким образом, ϵ_2 обрезается у максимума частоты, характеризующей возбуждения свободных пар дырка — частица, что непосредственно следует из (3.8).

в. $\epsilon_1(k\omega)$ обращается в нуль в области частот, при которых $\epsilon_2 = 0$. В случае очень больших частот имеем асимптотическую формулу

$$\epsilon_1(k\omega) \rightarrow 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \omega \gg kv_F.$$

б. Корреляционные свойства электронного газа в приближении хаотических фаз должны следовать непосредственно из выражения

$$\begin{aligned} S(k) &= - \frac{k^2}{4\pi^2 Ne^2} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(k\omega)} = \\ &= \frac{k^2}{4\pi^2 Ne^2} \int_0^\infty d\omega \frac{\epsilon_2(k\omega)}{\epsilon_1^2(k\omega) + \epsilon_2^2(k\omega)}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

С помощью небольших выкладок можно показать, что

$$S(k) = \frac{1}{N} \langle \varphi_0 | \rho_k^{s*} \rho_k^s | \varphi_0 \rangle, \quad (3.12)$$

где ρ_k^s — экранированный оператор колебаний плотности, определяемый выражением

$$(\rho_k^s)_{n0} = (\rho_k)_{n0} \frac{1}{\varepsilon(k\omega_{n0})}, \quad (3.13)$$

а индексы состояний в (3.12) и (3.13) относятся к матричным элементам и частотам возбуждений для свободных частиц. Таким образом, корреляции, как мы видим, приводят к тому, что каждый электрон окружается поляризационным облаком (экранируется), которое движется вместе с частицей, так что колебания плотности, связанные с этим электроном, также «экранированы» (в приближении хаотических фаз) диэлектрической проницаемостью, связанной с характеристической частотой возбуждения. Выражение (3.13) можно получить, если заменить оператор рождения пары электрон — дырка

$$\rho_{kp} = C_k^+ C_{k-p}$$

экранированным оператором

$$\rho_{kp}^s = \frac{C_k^+ C_{k-p}}{\varepsilon\left(k, \frac{k \cdot p}{m} - \frac{p^2}{2m}\right)}.$$

Влияние этого фактора когерентности должно проявиться в значительном уменьшении величины матричных элементов парного возбуждения, так как и ε_1 и ε_2 пропорциональны k_{FT}^2/k^2 при больших длинах волн. Мы отметим еще, что корреляции между электронами с антипараллельными спинами в приближении хаотических фаз играют существенную роль, а именно парная корреляционная функция $g(r)$ становится равной нулю при $r = 0$. Приблизительный характер изменения этой функции, согласно приближению хаотических фаз, показан на фиг. 17. (Заметим, что этот график немного отличается от результатов Глика и Ферелла [61]. Я считаю, что их результаты неверны для малых расстояний.)

7. Энергия плазмона определяется дисперсионным соотношением

$$\epsilon_1(k\omega_k) = 0.$$

При больших длинах волн энергия плазмона характеризуется выражением

$$\omega_k = \omega_p \left(1 + \frac{3}{10} \frac{k^2 v_F^2}{\omega_p^2} + \dots \right). \quad (3.14)$$

Плазмон будет вполне определенным элементарным возбуждением системы до тех пор, пока его энергия не станет равной энергии возбуждаемых пар; это произойдет при

$$\omega_p \approx k_c v_F, \quad \text{или} \quad \frac{k_c}{k_F} \approx 0,47 r_s^{1/2}. \quad (3.15)$$

Если распад плазмона на пару электрон — дырка энергетически возможен, то он происходит очень быстро; поэтому целесообразно рассматривать плазмон как независимое возбуждение с большим временем жизни только для $k \leq k_c$.

8. Роль кулоновского взаимодействия в возникновении плазмонов и возбуждений экранированных пар можно проследить, рассматривая $S(k\omega)$. Имеем

$$S(k\omega) = - \frac{k^2}{4\pi^2 e^2} \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(k\omega)} = \frac{k^2}{4\pi^2 e^2} \frac{\epsilon_2(k\omega)}{|\epsilon(k\omega)|^2}. \quad (3.16)$$

При больших длинах волн мы можем разделить $S(k\omega)$ на две части. Первая является вкладом от пар, существенным в области частот, где $\epsilon_2(k\omega)$ отлично от нуля. Эту часть можно записать в виде

$$S_{\text{pair}}(k\omega) = \sum_{\mu} \frac{|(\rho_k)_{\mu 0}|^2 \delta(\omega - \omega_{\mu 0})}{|\epsilon(k, \omega_{\mu 0})|^2}, \quad (3.17)$$

где индекс μ характеризует плоские волны в невзаимодействующей электронной системе. Мы видим, что S_{pair} обладает тем же самым непрерывным спектром энергий, что и спектральная функция свободного электронного газа $S_{HF}(k\omega)$, вычисленная в приближении

Хартри—Фока; однако величина парных возбуждений уменьшается из-за фактора когерентности $1/|\epsilon(k\omega)|^2$. При больших длинах волн это уменьшение велико, порядка k^4/k_{FT}^4 . Заметим, что (3.17) — это результат, который следовало ожидать согласно выражению (3.13); он обусловлен наличием экранирующих облаков вокруг каждого электрона.

Вторая часть $S(k\omega)$ определяется вкладом от плазмонов, существенным в области частот, где $\epsilon_2(k\omega) = 0$ и $\epsilon_1(k\omega) \neq 0$. Для этой области при тщательном проведении асимптотической оценки можно получить

$$S(k\omega) \underset{\text{plasmon}}{\approx} \frac{Nk^2}{2\omega_k} \delta(\omega - \omega_k) \quad (3.18)$$

с точностью порядка k^4/k_{FT}^4 .

Таким образом, мы видим, что при больших длинах волн когерентные эффекты таковы, что преобладающими возбуждениями будут плазмоны, а возбуждение пар в значительной мере экранировано. Этот вывод относится в равной мере и к $F(k\omega)$ — фурье-образу функции Грина колебаний плотности. Действительно, используя (2.50), имеем

$$F(k\omega) = \frac{Nk^2}{2m\omega_k} \left(\frac{1}{\omega - \omega_k + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_k - i\delta} \right) + \sum_{\mu} \frac{(p_k)_{\mu 0}^2}{|\epsilon(k, \omega_{\mu 0})|^2} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mu 0} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mu 0} - i\delta} \right). \quad (3.19)$$

Первый член в (3.19) является функцией Грина свободных бозонов, второй — соответствует распространению экранированных колебаний плотности. Приведенное здесь разделение (см. также Дюбуа [60]) совершенно аналогично разделению, сделанному в методе коллективных переменных, для колебаний плотности на плазменную часть и часть, содержащую вклад отдельных частиц (коллективные переменные в этом методе введены для описания плазмонов). Заметим, что проведенное разделение имеет смысл только для значений волновых векторов, меньших k_c , для которых

плазмоны существуют как независимые возбуждения. При рассмотрении высших порядков даже эти длинноволновые возбуждения, т. е. плазмоны, затухают, но тем не менее приближенное разделение на типы возбуждений продолжает оставаться полезным для многих приложений.

9. Ранее мы показали, что, найдя распределение по углам и энергиям быстрых электронов при неупругом рассеянии, мы тем самым непосредственно определяем величину $S(k\omega)$. Соответствующее выражение для вероятности того, что в единицу времени быстрый электрон передаст электронному газу импульс k и энергию ω , имеет вид

$$\frac{dP}{dt}(k\omega) = 2\pi V_k^2 S(k\omega) = \frac{8\pi e^2}{k^2} \frac{\epsilon_2(k\omega)}{\epsilon_1^2(k\omega) + \epsilon_2^2(k\omega)}. \quad (3.20)$$

В связи с этим, привлекая (3.17) и (3.18), можно ожидать, что при больших длинах волн (малые углы рассеяния) большая часть энергии и импульса будет передаваться плазмонам и довольно незначительная часть — экранированным возбуждениям пар электрон — дырка. Более того, можно непосредственно показать, что плазмоны удовлетворяют нормировочному соотношению (2.37) для $S(k\omega)$ с точностью до порядка k^4/k_{FT}^4 . Для электронного газа нормировочное соотношение часто записывают в виде

$$\int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(k\omega)} = -\frac{\pi}{2} \omega_p^2. \quad (3.21)$$

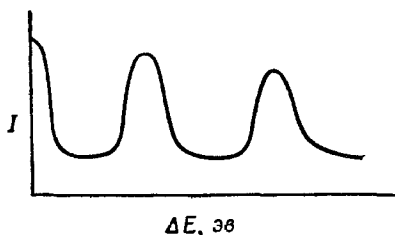
Сопоставляя это выражение с (3.16), мы находим, что оно представляет собой нормировочное соотношение для передаваемой в единицу времени энергии при фиксированном k , и его можно записать в виде

$$\frac{dW}{dt} = \int_0^\infty d\omega \omega \frac{dP}{dt}(k\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{k^2} \omega_p^2, \quad (3.22)$$

совпадающем с нормировочным соотношением Бете для тормозной силы. Заметим далее, что при переходе

к коротким длинам волн ($k \geq k_c$) плазмон перестает быть доминирующим возбуждением. Он расплывается в непрерывный спектр, и мы измеряем только возбуждения пар квазичастиц (Глик и Фэррелл [61]).

10. Основным экспериментальным доказательством существования плазмонов (как вполне определенного типа возбуждений в электронных системах) служат опыты, характеризующие потери энергии в твердых телах. В таких экспериментах измеряют спектр энергии (~ 1 кэв) электронов при эмиссии их из тонких



Фиг. 19. К опыту по обнаружению плазмонов.

I — интенсивность пучка, ΔE — потери энергии.

пленок данного вещества или при отражении их от поверхности испытуемого твердого тела. Типичный результат такого эксперимента изображен на фиг. 19.

Часто наблюдаются значительные энергетические потери, если энергия исходного кванта близка к энергии плазмона в системе свободных электронов. Причина этого проста: энергия плазмона в твердом теле порядка 10—25 эв; это очень большая энергия по сравнению с периодическим потенциалом, создаваемым ионами решетки, который зачастую порядка нескольких электронвольт; поэтому электроны, совершая колебания с частотой ω_p , как бы «не чувствуют» периодичности этого потенциала и ведут себя как свободные. Можно легко описать плазмоны в твердом теле с помощью приближения хаотических фаз — результаты находятся в хорошем качественном и часто количественном согласии с экспериментом. Для дальнейшего ознакомления со свойствами плазмонов в

твердых телах см. работы Пайнса [65], Нозьера и Пайнса [12], Пайнса [66].

11. Энергию основного состояния можно вычислить с помощью выражений (2.58) и (3.6) (Хаббард [11]). Этот результат согласуется с результатом Гелл-Манна и Бракнера [6]. Сравнение этих результатов упрощается, если результат Гелл-Манна — Бракнера записать в виде

$$\frac{E_0}{N} = \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{3}{4\pi\alpha^2 r_s^2} \int_0^\infty dk k^3 \int_0^\infty du \times \\ \times \ln [1 + \pi_0(k, iku)] - \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2}. \quad (3.23)$$

После простого преобразования выражения для диэлектрической проницаемости и соответствующего выбора контура интегрирования (Савада и др. [8]) получаем

$$\frac{E_0}{N} = \frac{2,21}{r_s^2} + \sum_k \frac{1}{2\pi} \int_0^{e^2} \frac{d\alpha}{\alpha} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \frac{1}{1 + \pi_0^\alpha(k, \omega)} - \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} \quad (3.24)$$

и убеждаемся в идентичности обоих выражений для энергии. Имеем окончательный результат (в ридбергах)

$$\frac{E_0}{N} = \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + 0,62 \ln r_s - 0,142. \quad (3.25)$$

Необходимо также заметить, что, как это следует из (3.18) и (3.24), существует явный вклад в энергию основного состояния от нулевых колебаний плазмона, равный $\sum_k \omega_k / 2$. Наконец, отметим, что замечания, сделанные Савадой и др. [8] относительно сравнения теории Гелл-Манна и Бракнера [6, 7] с теорией Бома и Пайнса [4], не совсем правильны. Обе теории, как это показали Нозьер и Пайнс [12], приводят к идентичным разложениям при больших длинах волн. Так вклад в корреляционную энергию, связанный с областью

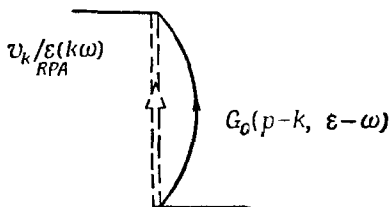
малых импульсов передачи k (т. е. с областью больших длин волн), имеет вид

$$E_{\text{corr}}(\beta) = \sum_{k < \beta k_F} E_{\text{corr}}(k) =$$

$$= -0,46 \frac{\beta^2}{r_s} + 0,87 \frac{\beta^3}{r_s^{3/2}} - 0,98 \frac{\beta^4}{r_s} +$$

$$+ 0,019 \frac{\beta^4}{r_s^5} + 0,71 \frac{\beta^5}{r_s^{3/2}} + \dots \quad (3.26)$$

Члены с четными степенями β возникают вследствие экранирования взаимодействия между отдельными частицами, члены с нечетными степенями связаны с нулевыми колебаниями плазмонов.



Фиг. 20.

12 Физическая структура квазичастиц в приближении хаотических фаз ясна из предшествующего обсуждения: это — электрон и связанное с ним экранирующее облако. Облако виртуальных возбуждений, движущихся вместе с электроном, представляет собой обратный поток частиц, окружающих электрон во время его движения (Вычисление вклада в этот обратный поток см. в работе Пайнса и Шриффера [110].)

Энергия квазичастицы вычисляется непосредственно с помощью обменной собственно энергетической диаграммы с экранированным взаимодействием (фиг. 20). Используя правила для временной теории возмущений, имеем

$$\Sigma(p, \epsilon) = i \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{4\pi e^2/k^2}{\epsilon - \omega - \epsilon(p-k) + i\delta_{p-k}} \frac{1}{\epsilon_{RPA}(k\omega)},$$

$$(3.27)$$

здесь нужно использовать выражение для переменной диэлектрической проницаемости, полученное в приближении хаотических фаз. Это вычисление было проведено впервые Куинном и Фэррелом [67]. Они нашли для энергии квазичастицы вблизи поверхности Ферми следующее выражение:

$$\hat{\epsilon}(p) = \frac{p_F^2}{2m} \left\{ \frac{p^2}{p_F^2} - 0,166r_s \left[\frac{p}{p_F} (\ln r_s + 0,203) + \ln r_s - 1,80 \right] + i (0,252r_s^{1/2}) \left[\frac{p}{p_F} - 1 \right]^2 \right\}. \quad (3.28)$$

Это выражение непосредственно приводит к результату Гелл-Манна [7] для удельной теплоемкости в приближении хаотических фаз

$$\frac{C_{RPA}}{C_s} = 1 + 0,083r_s (\ln r_s + 0,203), \quad (3.29)$$

где C_s — значение, полученное Зоммерфельдом для удельной теплоемкости свободных электронов.

13. Следующий вопрос, представляющий несомненный физический интерес, — это проблема экранирования электронным газом частиц примеси. Если величина фиксированного заряда равна Z (предполагается, что заряд слабо взаимодействует с электронами), то непосредственно из выражения (2.32) находим, что возникающая плотность поляризационного заряда равна

$$-e \delta\rho(r) = - \sum_k Z e^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon(k0)} - 1 \right\} e^{ikr}, \quad (3.30)$$

а соответствующий ей потенциал имеет вид

$$\varphi(r) = \sum_k \frac{4\pi Ze}{k^2} \frac{1}{\epsilon(k0)} e^{-ikr}. \quad (3.31)$$

Статическая диэлектрическая проницаемость в приближении хаотических фаз дается формулой

$$\epsilon(k0) = 1 + \frac{k_{FT}^2}{k^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_F}{2k} \left(1 - \frac{k^2}{4k_F^2} \right) \ln \left| \frac{k + 2k_F}{k - 2k_F} \right| \right]. \quad (3.32)$$

Эта величина при малых k ведет себя как $1 + (k_{FT}^2/k^2)$. Поэтому можно было бы ожидать при малых k , что на больших расстояниях величина экранирующего заряда пренебрежимо мала и потенциал, обусловленный примесью, спадает как $\exp(-k_{FT}r)/r$. Однако ситуация оказывается сложнее, так как $\epsilon(k_0)$ обладает логарифмической расходимостью: $d\epsilon/dk \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow 2k_F$. Причина этой сингулярности лежит в резкой очерченности поверхности Ферми (Кон [98]). Расчет показывает, что на больших расстояниях плотность индуцированного заряда и соот-



Фиг. 21.

ветствующий ей потенциал изменяются как $\cos(2p_{Fr})/r^3$ (Лангер и Воско [62]). Это возмущение системы заметно проявляется на довольно больших расстояниях, что впервые обнаружено в экспериментах по ядерному магнитному резонансу, в которых изучалось влияние примесей на найтовский сдвиг (Роуланд).

14. Поправки к приближению хаотических фаз связаны с учетом неприводимых поляризационных диаграмм следующих порядков, дающих существенный вклад в диэлектрическую проницаемость. Такие диаграммы приведены на фиг. 21 и соответствуют взаимодействию электрона и дырки через экранированное кулоновское поле и собственно энергетической поправке электрона (или дырки). Учет этих членов при расчете свойств электронного газа производился Нозьером и Пайнсом [64] (метод коллективных координат) и Дюбуа [60] (методы теории поля). Выражение для энергии основного состояния изменяется по сравнению с (3 25) на константу, которая получается фактически при учете вклада от обменной диаграммы второго порядка теории возмущений. Величина этой

константы была определена Гелл-Манном и Бракнером и равна 0,046, так что энергия основного состояния (в ридбергах) с учетом членов высших порядков по r_s принимает вид

$$\frac{E_0}{N} = \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + 0,626 \ln r_s - 0,096 + \dots \quad (3.33)$$

В этом же приближении определены как сдвиг энергии плазмонов (Нозьер и Пайнс [12]), так и их затухание [учитываются матричные элементы распада плазмона на две пары электрон — дырка (Дюбуа [60])] Энергия плазмона для больших длин волн равна

$$\omega_k = \omega_p \left\{ 1 + \frac{k^2}{k_F^2} \left[\frac{1,3}{r_s} - \frac{3}{40} + i4,4r_s^{1/2} \right] + \dots \right\}. \quad (3.34)$$

Дюбуа подсчитал также поправки для некоторых других характеристик системы.

15 Нозьер и Пайнс пришли к заключению, что вряд ли целесообразно стремиться улучшать результаты приближения хаотических фаз, так как последнее специфично лишь для случая высокой плотности, и разложение в ряд по соответствующему параметру допустимо лишь при $r_s \leq 1$ независимо от количества поправочных членов. Для ознакомления с деталями выдвигаемых нами различных положений я отсылаю читателя к нашей статье (Нозьер и Пайнс [12]). Мы получили, что при малых импульсах передачи приближение хаотических фаз справедливо даже для реальных плотностей электронов в металлах ($1,8 \leq r_s \leq 5,5$), но при больших импульсах передачи преобладающим эффектом является взаимодействие электронов с антипараллельными спинами. К точно таким же выводам пришел Хаббард [11] Хаббард утверждал, что при больших значениях импульсов передачи вклад в данную диаграмму от обменного рассеяния стремится в половину сократить вклад от прямого рассеяния Он предложил в связи с этим заменить вклад от основной поляризационной

диаграммы $\pi_0(k\omega)$ выражением

$$\frac{\pi_0(k\omega)}{1 + \frac{1}{2} \left[\frac{k^2}{k^2 + k_F^2} \right] \pi_0(k\omega)}.$$

Мы видим, что при малых k величина $\pi_0(k\omega)$ изменяется незначительно; но при больших k ($k \gg k_F$)

$$\pi_0(k\omega) \rightarrow \frac{\pi_0(k\omega)}{2}.$$

С помощью простого интерполяционного метода для области между большими и малыми импульсами передачи Нозьером и мной [12] было получено следующее приближенное выражение для корреляционной энергии (в ридбергах):

$$E_{\text{corr}} \approx -0,115 + 0,031 \ln r_s, \quad (3.35)$$

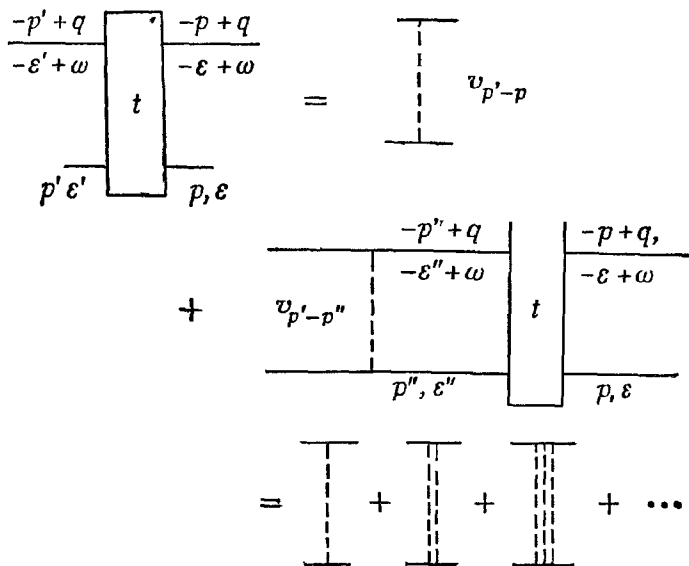
которое хорошо согласуется с результатами, полученными с помощью интерполяционной техники Хаббарда. Проведенные в Иллинойском университете вычисления показывают, что подобная интерполяционная техника позволяет получить для удельной теплоемкости и спиновой восприимчивости результаты, которые находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными (Сильверстейн).

§ 2 СИСТЕМЫ ФЕРМИОНОВ С КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИМИ СИЛАМИ ОТТАЛКИВАНИЯ

1. Вычисление энергии основного состояния и спектра возбуждений квазичастиц ферми-газа с низкой плотностью весьма подробно изложено в статье Галицкого [18]. Поэтому я бы желал сделать только несколько дополнительных и разъясняющих замечаний.

2. Как показал Галицкий, при рассмотрении случая низкой плотности необходимо принять во внимание многократное рассеяние пары частиц друг на друге. В самом деле, важнейшими членами первого порядка являются те члены, которые соответствуют повтор-

ному рассеянию пары друг на друге, при этом не происходит ни возбуждения частиц фона (дырок), ни обмена с ними. Эти члены просто суммируются с помощью t -матрицы, которая определяется уравнением, изображенным диаграммой на фиг. 22. Уравнение,



Ф и г. 22.

учитывающее все лестничные диаграммы, записывается в виде

$$\begin{aligned}
 t(pp'; q\omega) = & V_{p-p'} + i \int \frac{d^3 p''}{(2\pi)^3} \int \frac{d\epsilon''}{2\pi} V_{p'-p''} \times \\
 & \times \frac{1}{-\epsilon'' + \omega - \epsilon(q-p'') + i\delta_{q-p''}} \times \\
 & \times \frac{t(pp'', q\omega)}{\epsilon'' - \epsilon(p'') + i\delta_{p''}}. \quad (3.36)
 \end{aligned}$$

Расположение полюсов подынтегрального выражения в комплексной ϵ'' -плоскости таково, что отличный

от нуля результат получится только тогда, когда одновременно $p'' > p_F$ и $|p'' - q| > p_F$ или $p'' < p_F$ и $|p'' - q| < p_F$ в соответствии с тем, является ли промежуточное состояние состоянием частица — частица или дырка — дырка. Выполняя интегрирование по ϵ'' , находим

$$\begin{aligned}
 t(pp'; q\omega) = & V_{p' p'} - \\
 & - (2\pi)^{-3} \int_{\substack{p' > p_F \\ |p'' + q| > p_F}} dp'' \frac{V_{p' - p''} t(pp''; q\omega)}{\omega - \epsilon(p'') - \epsilon(p'' + q) - i\delta} + \\
 & + (2\pi)^{-3} \int_{\substack{p'' < p_F \\ p'' - q < p_F}} dp'' \frac{V_{p'' - p'} t(pp'', q\omega)}{\omega - \epsilon(p'') - \epsilon(p'' + q) - i\delta}. \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

3 Галицкий, решая уравнение (3.37), выражает t с помощью t_{free} — матрицы рассеяния двух частиц (без учета влияния заполненной сферы Ферми); эту величину можно получить, решая эквивалентное уравнение Шредингера для двух частиц. Поэтому мы не сталкиваемся с дополнительными трудностями при изучении произвольного сильного взаимодействия, носящего характер отталкивания (включая случай твердых сфер).

Находим, что в первом порядке

$$t \approx \frac{4\pi f_0}{m} + \dots, \quad (3.38)$$

где f_0 длина рассеяния s -волны в задаче двух тел. Поправки к (3.38) получаются при учете рассеяния дырки на дырке и учете влияния сферы Ферми на рассеяние частицы на частице.

4. Энергия квазичастицы рассчитывается с помощью собственно энергетической диаграммы первого

порядка, включающей t -матрицу. Таким образом, имеем

$$-i\Sigma(p, \varepsilon) = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2}$$

$$\Sigma(p, \varepsilon) = -i2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{t(pp; q\omega)}{\omega - \varepsilon - \varepsilon(q-p) + i\delta_{q-p}} +$$

$$+ i \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{t(p, q-p; q\omega)}{\omega - \varepsilon - \varepsilon(q-p) + i\delta_{q-p}}, \quad (3.39)$$

где множитель 2 учитывает два возможных спиновых состояния во вкладе от необменного рассеяния. В низшем порядке, соответствующем (3.38), получаем, что энергия квазичастицы имеет постоянный сдвиг:

$$\Sigma_1(p, \varepsilon) = \frac{2\pi N f_0}{m}. \quad (3.40)$$

5. Учитывая поправки высших порядков для величины t , Галицкий [18] получил следующее значение для энергии квазичастицы вблизи поверхности Ферми:

$$\varepsilon(p) = \frac{p_F^2}{2m} \left\{ \frac{p^2}{p_F^2} + \frac{4}{3\pi} p_F f_0 + \frac{4}{15\pi^2} p_F^2 f_0^2 [11 - 2 \ln 2] - \right.$$

$$\left. - \left(\frac{16}{15\pi} \right)^2 p_F^2 f_0^2 \left(\frac{p}{p_F} - 1 \right) (7 \ln 2 - 1) - \right.$$

$$\left. - i \frac{2p_F^2 f_0^2}{\pi} \left[\frac{p}{p_F} - 1 \right]^2 \right\} + \dots \quad (3.41)$$

Заметим, что мнимая часть $\varepsilon(p)$ в окрестности p_F пропорциональна $(p - p_F)^2$, как и в случае электронного газа, что, впрочем, можно было ожидать, исходя из самых общих соображений.

6. Параметром разложения для ферми-газа с низкой плотностью является $p_F f_0$ или f_0/r_0 — отношение длины рассеяния к расстоянию между частицами; следовательно, мы должны иметь

$$p_F f_0 \ll 1, \quad (3.42)$$

но это условие не удовлетворяется ни для He^3 , ни для ядерной материи: в обеих системах $f_0 \approx r_0$.

7. Галицкий [18] вычислил энергию основного состояния, определив

$$\mu = \varepsilon(p_F)$$

и используя соотношение

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N}.$$

Он нашел

$$\frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} \left[1 + \frac{10}{9\pi} p_F f_0 + \frac{4}{21\pi^2} (11 - 2 \ln 2) p_F^2 f_0^2 + \dots \right]. \quad (3.43)$$

Этот результат был также получен Хуан Кунем и Янгом [75], де Доминиссом и Мартиным [73] методом псевдопотенциала, а также Абрикосовым и Халатниковым [71] на основании теории ферми-жидкости Ландау.

8. Коллективными возбуждениями системы являются фононы, соответствующие нулевому звуку. Дисперсионное соотношение можно определить в первом порядке в приближении хаотических фаз, принимая за эффективный потенциал $t \approx 4\pi f_0/m$. [См., например, (2.75).] Дисперсионное соотношение в случае больших длин волн (Абрикосов и Халатников [71], Голдстоун и Готтфрид [19], Готтфрид и Пичмен [74]) имеет вид

$$\omega(k) = kv_F \left\{ 1 + 0,270e^{-1/\xi} \left[1 + 0,309 \left(\frac{k}{k_c^0} \right)^2 + \dots \right] \right\}. \quad (3.44)$$

где

$$\xi = \frac{p_F f_0}{\pi} \quad (3.45)$$

и

$$k_c^0 = 0,736 k_F e^{-1/\xi} \quad (3.46)$$

— волновой вектор, при котором фононный спектр сливается со спектром пар частица — дырка. Заметим,

что в пределе низкой плотности фононный спектр весьма близко примыкает к области непрерывного спектра пар частица — дырка.

9. Готтфрид и Пичмен [74] рассмотрели отдельные члены высших порядков разложения в случае, когда параметром является низкая плотность; эти члены приводят к сдвигу частоты нулевого звука и к затуханию фононов. Подробное обсуждение этих явлений содержится в статье [74].

10. Бракнер [38] и его сотрудники предприняли попытку выйти за пределы приближения низкой плотности; они просуммировали некоторый класс диаграмм высших порядков способом, эквивалентным следующей процедуре.

а. Функции Грина промежуточных состояний в уравнении, определяющем t -матрицу, считаются функциями Грина квазичастиц с массовым оператором (3.39).

б. Получающиеся уравнения нелинейны. Действительно, в качестве обобщения (3.37) будем иметь уравнение, в котором $\epsilon(p)$ везде заменено выражением

$$\epsilon(p) = \tilde{\epsilon}(p) + \Sigma(p, \epsilon), \quad (3.47)$$

причем зависимость $\Sigma(p, \epsilon)$ от t -матрицы определяется уравнением (3.39).

в. Бракнер решает эту систему уравнений, предварительно сделав следующие приближения.

1. Пренебрежение процессами распространения комплекса дырка — дырка (приближение, которое можно сделать только для достаточно низких плотностей).

2. Пренебрежение всякой зависимостью $\Sigma(p, \epsilon)$ от энергии.

3. Пренебрежение влиянием ферми-поверхности на процессы распространения. Что дают эти приближения, можно видеть на примере уравнения (3.37). Энергия рассеивающейся пары ω считается равной энергии этих частиц в системе их центра масс, а именно $q^2/4$. Тогда энергетический знаменатель стано-

вится равным

$$\frac{q^2}{4} + p''(p'' + q) + 2\Sigma(p'').$$

Если, кроме того, сделать замену импульсных переменных, введя относительный импульс пары в промежуточном состоянии

$$k'' = p'' + \frac{q}{2},$$

то знаменатель примет вид

$$k''^2 + 2\Sigma(p''),$$

удобный при дальнейших вычислениях.

Подводя итог, мне хотелось бы сказать, что идея Бракнера выйти за пределы рассмотрения приближения низкой плотности с помощью системы самосогласованных уравнений остроумна и плодотворна, но в настоящее время у нас не имеется данных, чтобы предсказать, к чему приведет суммирование определенных членов и будут ли приближения «а» — «в» отражать физическую сущность систем промежуточной плотности.

§ 3 СИСТЕМЫ БОЗОНОВ В СЛУЧАЕ СИЛ ОТТАЛКИВАНИЯ

1. Исходный гамильтониан имеет вид ($v_k = V_k/\Omega$):

$$H = \sum_p \epsilon(p) a_p^\dagger a_p + \sum_{kpq} \frac{v_k}{2} a_{p+k}^\dagger a_{q-k}^\dagger a_q a_p, \quad (3.48)$$

где операторы рождения и уничтожения бозонов удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[a_p, a_q^\dagger] = \delta_{pq}, \quad [a_p, a_q] = [a_p^\dagger, a_q^\dagger] = 0. \quad (3.49)$$

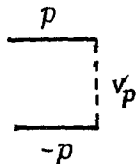
В идеальном бозе-газе число частиц конденсата с нулевым импульсом N_0 является макроскопическим числом, равным N . Предположим, следуя Боголюбову [20], что при наличии взаимодействия N_0 продолжает оставаться конечной частью N . Мы увидим, что это допущение непосредственно приводит к предсказанию сверхтекучести в бозе-системах.

2. Рассмотрим действие операторов a_0 и a_0^+ на волновую функцию основного состояния Ψ_0 .

Имеем

$$\begin{aligned} a_0 |\Psi_0(N_0)\rangle &= N_0^{1/2} |\Psi_0(N_0 - 1)\rangle, \\ a_0^+ |\Psi_0(N_0)\rangle &= (N_0 + 1)^{1/2} |\Psi_0(N_0 + 1)\rangle, \end{aligned} \quad (3.50)$$

где $\Psi_0(N_0)$ — волновая функция основного состояния, когда в состоянии с нулевым импульсом находится N_0 частиц, $\Psi_0(N_0 - 1)$ — волновая функция, когда в состоянии с нулевым импульсом находится $N_0 - 1$ частиц, и т. д. Мы видим, что если $N_0 \gg 1$, то можно сделать следующие упрощения:



Фиг. 23.

а. Заменить $(N_0 + 1)^{1/2}$ на $(N_0)^{1/2}$.

б. Допустить, что разница между $\Psi_0(N_0 - 1)$ и $\Psi_0(N_0 + 1)$ порядка $1/N$; это значит, что удаление или добавление одной частицы в состояние с нулевым импульсом не изменяет физических свойств системы.

В рассматриваемом приближении операторы a_0 и a_0^+ будут коммутировать друг с другом; так как они уже коммутировали со всеми a_p и a_p^+ при $p \neq 0$, то их можно просто заменить c -числами, т. е. $\sqrt{N_0}$. В этом заключается знаменитое предложение Боголюбова, сводящееся к пренебрежению динамическим поведением конденсированной части системы.

3. Согласно этой процедуре, гамильтониан системы более не сохраняет общего числа частиц. Так, часть членов взаимодействия в выражении (3.48) сводится к сумме

$$\frac{1}{2} \sum_p N_0 v_p a_p^+ a_{-p}^+$$

соответствующей процессам, представленным графически на фиг. 23 и отвечающим рождению пар частиц. Или, другими словами, оператор числа частиц

$$N_{0p} = \sum_p a_p^+ a_p$$

перестает коммутировать с гамильтонианом, если мы заменим a_0 и a_0^+ на $\sqrt{N_0}$. Последовательная процедура преодоления этой трудности заключается в добавлении к гамильтониану (3.48) члена $-\mu N_{0p}$ (где μ — химический потенциал). Это даст нам, заимствуя выражение Боголюбова, «разрешение на разбой» при рассмотрении промежуточных состояний, в которых число частиц не сохраняется, однако среднее число частиц в предлагаемом методе считается фиксированным (Гугенгольд и Пайнс [24]). Таким образом, мы приходим к следующему гамильтониану:

$$H' = H_1 + H_2, \quad (3.51a)$$

где

$$H_1 = \sum'_p \tilde{\varepsilon}(p) a_p^+ a_p + \sum'_p N_0 v_p (a_{-p}^+ a_p^+ + a_p a_{-p}), \quad (3.51b)$$

$$H_2 = \sum'_p V \bar{N}_0 v_k (a_{p+k}^+ a_k a_p + a_{p+k}^+ a_{-k}^+ a_p) + \\ + \sum'_{kpq} \frac{v_k}{2} a_{p+k}^+ a_{q-k}^+ a_q a_p \quad (3.51b)$$

и

$$\tilde{\varepsilon}(p) = \varepsilon(p) + n_0 V_0 + n_0 V_k - \mu \quad (n_0 = N_0/\Omega) \quad (3.52a)$$

— энергия квазичастиц в приближении Хартри—Фока. Величины N_0 и μ должны быть определены из условий

$$N_0 + \langle \Psi_0 | \sum'_p a_p^+ a_p | \Psi_0 \rangle = N, \quad (3.53)$$

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} = \frac{\partial E'_0}{\partial N_0}. \quad (3.54)$$

где штрих у знака суммы означает, что состояния с нулевым импульсом должны быть опущены, E_0 — энергия основного состояния системы H , а E'_0 — энергия основного состояния системы H' . Условие (3.53) обеспечивает сохранение среднего числа частиц.

4. Далее Боголюбов предполагает, что в соответствующем приближении (которое оказывается приближением слабого взаимодействия) члены в H_1 яв-

ляются большими по сравнению с членами в H_2 . Оператор H_1 можно диагонализировать с помощью следующего канонического преобразования:

$$\begin{aligned} a_k &= u_k \alpha_k - v_k \alpha_{-k}^+, \\ a_k^+ &= u_k \alpha_k^+ - v_k \alpha_{-k}, \\ u_k^2 - v_k^2 &= 1, \quad u_k^+ = u_k, \quad v_k^+ = v_k. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Условие, связывающее u_k и v_k , гарантирует каноничность указанного преобразования, т. е.

$$\begin{aligned} [\alpha_k, \alpha_{k'}^+] &= \delta_{kk'}, \\ [\alpha_k, \alpha_{k'}] &= [\alpha_k^+, \alpha_{k'}^+] = 0. \end{aligned}$$

Требую, чтобы преобразованный гамильтониан был диагонален, находим, что

$$H_1 = \sum_k' \left(\omega_k \alpha_k^+ \alpha_k + \frac{\omega_k}{2} - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{2} \right), \quad (3.56)$$

причем

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\omega_k} \right), \\ v_k^2 &= \frac{1}{2} \left(-1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\omega_k} \right) \end{aligned} \quad (3.57)$$

и

$$\omega_k^2 = \tilde{\epsilon}_k^2 - n_0^2 V_k^2 = \epsilon_k^2 + 2\epsilon_k n_0 V_k, \quad (3.58)$$

где мы, используя соотношение

$$\mu = n_0 V_0,$$

учли, что

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k + n_0 V_k. \quad (3.526)$$

5. Гамильтониан (3.56) описывает совокупность невзаимодействующих квазичастиц, энергия которых определяется выражением

$$\omega_k = \left(\frac{k^2 n_0 V_k}{m} + \frac{k^4}{4m^2} \right)^{1/2}. \quad (3.59)$$

При больших длинах волн (или малых k) эти возбуждения являются фононами, распространяющимися со скоростью

$$s = \left(\frac{n_0 V_0}{m} \right)^{1/2}.$$

При коротких длинах волн спектр квазичастиц напоминает спектр свободных частиц, энергия которых равна $k^2/2m$. При значении волнового вектора

$$k_c = 2(mn_0 V_0)^{1/2} \approx 2ms$$

происходит переход фононного типа возбуждения системы к квазичастичному. Обратная величина

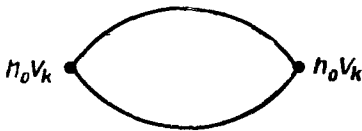
$$\lambda_c = \frac{1}{2ms}$$

характеризует естественную величину расстояния, выше которой существенную роль во взаимодействии между частицами играют когерентные эффекты. Эту величину можно назвать корреляционной длиной, при этом мы должны ясно представлять, что эта величина относится к корреляциям между возбуждениями системы. Эти корреляции существенно отличаются от дальнодействующих корреляций, приводящих к конденсации состояний с $k = 0$.

Характерным моментом теории является то, что одночастичные возбуждения имеют фононный характер, так что уже само приближение Боголюбова удовлетворяет критерию Ландау для сверхтекучести: возбуждения не могут возникнуть в потоке, скорость которого $v < s$.

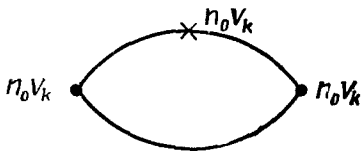
6. Представляет интерес рассмотреть метод канонического преобразования с точки зрения применяемой в проблеме многих тел теории возмущений. Можно показать, что этот прием эквивалентен проведению суммирования сильно расходящихся членов в степенном разложении теории возмущений для энергии основного состояния (Бракнер и Савада [81]). Указанные расходимости носят следующий характер:

во втором порядке



$$\Delta E = - \sum_k \frac{n_0^2 V_k^2}{k^2/m},$$

в третьем порядке



$$\Delta E = - \sum_k \frac{(n_0 V_k)^3}{(k^2/m)^2}.$$

Символом «X» обозначен прямой процесс рассеяния, вклад от которого пропорционален $n_0 V_k$. При переходе к высшим порядкам расходимость при малых k , связанная с итерацией членов, включающих данный импульс передачи k , становится все более и более значительной. Однако если просуммировать такой ряд, то получается сходящийся результат:

$$E_0 = \sum_k \left(\frac{\omega_k}{2} - \frac{\tilde{\varepsilon}_k}{2} \right) + \frac{1}{2} N_0^2 v_0, \quad (3.60)$$

который можно получить непосредственно из формулы (3.56), если добавить при переходе от E'_0 к E_0 член $1/2 N_0^2 v_0$.

7. Суммирование этого ряда эквивалентно приближению хаотических фаз, так как члены всех порядков содержат один и тот же импульс передачи k . Рассмотрим в связи с этим зависящую от частоты и волнового вектора экранирующую диэлектрическую проницаемость $\varepsilon'(k\omega)$, аналогичную диэлектрической проницаемости для ферми-газа (Нозьер и Пайнс [13]). Имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon'(k\omega) &= 1 + V_k \pi'_0(k\omega) = \\ &= 1 - V_k \sum_{\mu} (\rho_k)_{\mu 0}^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mu 0} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mu 0} - i\delta} \right), \end{aligned} \quad (3.61)$$

где состояния μ соответствуют состояниям системы без взаимодействия. Поэтому получаем

$$\begin{aligned}(\rho_k)_{\mu 0} &= n_0, \\ \omega_{\mu 0} &= \frac{k^2}{2m}\end{aligned}$$

и

$$\epsilon'(k\omega) = 1 - \frac{n_0 k^2 V_k / m}{\omega^2 - \frac{k^4}{4m^2} + i\delta}. \quad (3.62)$$

Нули этого выражения определяют спектр фононов в соответствии с формулой (3.59), так что спектр квазичастиц, полученный в приближении Боголюбова, совпадает со спектром коллективных возбуждений. Если записать энергию взаимодействия в виде (2.58) и проинтегрировать согласно (2.59) по параметру взаимодействия, то мы снова придем к формуле (3.59) (Нозьер и Пайнс [13]).

8. Используя либо (3.62), либо преобразование Боголюбова, можно легко заметить, что

$$S(k\omega) = \frac{n_0 k^2}{2m\omega_k} \delta(\omega - \omega_k). \quad (3.63)$$

Поэтому нормировочное соотношение (2.37) сохранится для системы квазичастичных коллективных возбуждений только в случае $N_0 = N$.

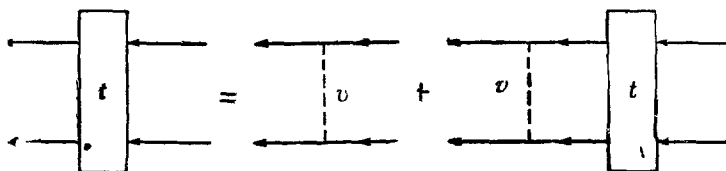
9. В пределах применимости приближения Боголюбова можно положить $N_0 = N$. Приближение Боголюбова — теория слабого взаимодействия, и

$$\begin{aligned}N - N_0 &= \langle 0 | \sum_p' a_p^+ a_p | 0 \rangle = \sum_p v_p^2 = \\ &= \sum_p \left[\frac{\epsilon_p + n_0 V_p}{\omega_p} \right] - 1 \approx 0(V_p).\end{aligned}$$

10. Итак, приближение Боголюбова, хотя и применимо только в случае слабого взаимодействия (что видно при подсчете простых диаграмм), является ключом к микроскопической теории сверхпроводимости, в которой в качестве возбуждений, близких

к основному состоянию, выступают фононы с линейной дисперсионной зависимостью при больших длинах волн.

11. Чтобы получить удовлетворительную микроскопическую модель системы с заданной величиной плотности, нужно выйти за пределы теории Боголюбова и учесть, кроме диаграмм приближения хаотических фаз, диаграммы многократного рассеяния. Это было сделано различными способами: методом псевдопотенциалов (Ли, Хуан Кунь и Янг [21]), с помощью



Фиг. 24.

суммирования лестничных диаграмм в теории возмущений Рэля — Шредингера (Бракнер и Савада [81]), а также с помощью методов теории поля (Беляев [23], Гугенгольц и Пайнс [24]). Методы теории поля мы более подробно рассмотрим несколько позднее; теперь же кратко рассмотрим метод суммирования ряда, в каждом слагаемом которого мы примем во внимание процессы многократного рассеяния, введя для этой цели t -матрицу. Используем для системы бозонов то же самое интегральное уравнение, что и для фермионов (фиг. 24), в котором, однако, будем теперь считать, что простая линия соответствует распространению свободной частицы и сопоставляется при этом с выражением

$$+iG_0(p, \epsilon) = \frac{i}{\epsilon - \epsilon(p) + i\delta}. \quad (3.64)$$

Тогда уравнение для t -матрицы [ср. (3.36) и (3.37)] запишется в виде

$$t_{\text{free}}(pp'; q\omega) = V_{p-p'} - (2\pi)^{-3} \int dp'' \times \\ \times \frac{V_{p''-p} t_{\text{free}}(pp'', q\omega)}{\omega - \epsilon(p'') - \epsilon(p'' + q) - i\delta}, \quad (3.65)$$

где t_{free} — матрица рассеяния для пары свободных частиц. Решение (3.65) в первом порядке по плотности имеет вид

$$t_{\text{free}} = \frac{f_0}{m},$$

где

$$f_0 = 4\pi a,$$

а a — длина рассеяния s -волны свободной частицы. Теперь мы можем заменить V_k на f_0/m во всех формулах теории Боголюбова; поступая таким образом, мы одновременно учитываем результаты суммирования лестничных диаграмм и диаграмм приближения хаотических фаз. Эта процедура весьма напоминает метод псевдопотенциалов, причем только напоминает, так как псевдопотенциал берется в виде

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{f_0}{m} \frac{\partial}{\partial r} [r\delta(r)], \quad (3.66)$$

а не в виде

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{f_0}{m} \delta(r). \quad (3.67)$$

Разница между (3.66) и (3.67) состоит в том, что при использовании последнего выражения для одновременного суммирования диаграмм приближения хаотических фаз и диаграмм t -матрицы (Нозьер и Пайнс [64]) возможны случаи двукратного учета некоторых диаграмм. Исследование показывает, что диаграммы для возбужденных состояний не повторяются дважды, но диаграмма, соответствующая энергии основного

состояния,  где ● теперь соответ-

ствует выражению

$$-iV_k^{\text{eff}} = -\frac{i}{m} f_0,$$

подсчитывается дважды: один раз как диаграмма приближения хаотических фаз, второй — как диа-

грамма приближения Хартри. Во втором случае указанный вклад имеет вид

$$N_0^2 f_0 / m = \bullet = \cdot + \text{loop} + \text{two-loops} + \text{three-loops} + \dots =$$

$$= \cdot + \text{loop with dots}$$

В связи с этим член

$$- \sum_k \frac{n_0 f_0^2}{m k^2} = - \text{loop with dots}$$

нужно вычесть из выражения для энергии основного состояния (2.59), в котором

$$V_k = \frac{f_0}{m}.$$

12. Отметим следующие свойства разреженного бозе-газа. Спектр возбуждений:

$$\omega_k = \left(\frac{n_0 k^2 f_0}{m^2} + \frac{k^4}{4m^2} \right)^{1/2},$$

где n_0 — плотность числа частиц с $p = 0$.

Скорость фононов:

$$s = \frac{1}{m} (n_0 f_0)^{1/2}.$$

Корреляционная длина:

$$\lambda_c = \frac{1}{2ms} = \frac{1}{2} (n_0 f_0)^{-1/2}.$$

Спектральная функция:

$$S(k) = \frac{k^2}{2m\omega_k} = \frac{k^2}{2m} \frac{1}{\left(\frac{n_0 k^2 f_0}{m^2} + \frac{k^4}{4m^2} \right)^{1/2}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{k_c^2}{k^2} \right)^{1/2}},$$

где

$$k_c = 2(n_0 f_0)^{1/2}.$$

Размытие основного состояния:

$$N = N_0 \left[1 + \frac{(n_0 f_0^3)^{1/2}}{3\pi^2} + \dots \right].$$

Энергия основного состояния:

$$\frac{1}{N} E_0 = \frac{nf_0}{2m} \left[1 + \frac{16}{15\pi^2} (nf_0^3)^{1/2} + \dots \right].$$

13. Параметр разложения $(nf_0^3)^{1/2}$ представляет собой отношение f_0 к корреляционной длине $(nf_0)^{-1/2}$; величина именно этого параметра играет существенную роль, так как для получения приемлемой теории бозе-системы необходимо с самого начала включить корреляции приближения хаотических фаз.

14. Вычисления для следующих порядков по $(nf_0^3)^{1/2}$ были произведены Ли и Янгом [88], Беляевым [23], Савадой [91], Ву [92], Гугенгольцем и Пайнсом [24] и были получены следующие результаты:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} E_0 &= \frac{nf_0}{2m} \left\{ 1 + \frac{16}{15\pi^2} (nf_0^3)^{1/2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{nf_0^3}{8\pi^2} \left(\frac{4}{3} - \frac{3}{\pi} \right) \ln(nf_0^3) + \dots \right\}, \\ \omega_k &= \frac{k}{m} (nf_0)^{1/2} \left\{ \left[1 + \frac{1}{\pi^2} (nf_0^3)^{1/2} \right] - \right. \\ &\quad \left. - i \frac{3}{640\pi} (nf_0^3)^{1/2} \left[\frac{p}{(nf_0)^{1/2}} \right]^1 + \dots \right\}; \end{aligned}$$

в случае малых импульсов квазичастиц

$$p \ll (nf_0)^{1/2}.$$

Мнимая часть в выражении для частоты ω_k возникает вследствие того, что учет членов высших порядков для газа с низкой плотностью включает процессы распада одного фонона на два. Следует заметить, что ввиду наличия в выражении для энергии основного состояния члена с $\ln nf_0^3$ выражение для нее уже не является простым разложением по степеням nf_0^3 .

15. Величина для скорости звука, полученная выше из спектра одночастичного возбуждения, соответствует величине, вычисленной, исходя из выражения

для энергии основного состояния, с помощью макроскопической формулы

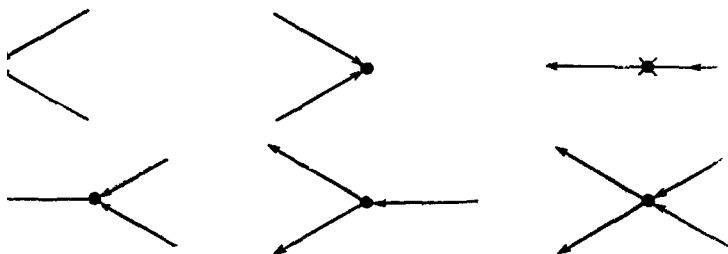
$$s = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)^{u_1},$$

где

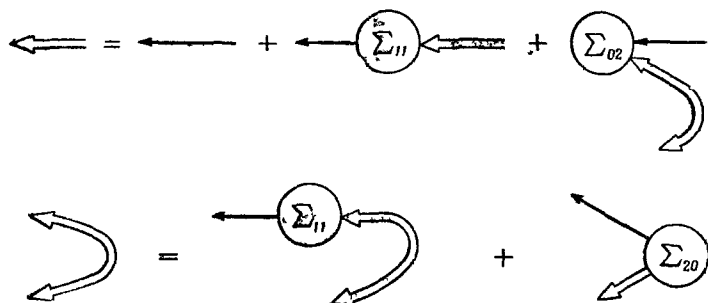
$$P = \rho^2 \frac{d}{d\rho} \left(\frac{E_0}{\rho} \right).$$

16. Развитие теории возмущений, основанной на методах теории поля, для системы бозонов на первый взгляд сильно усложнено макроскопическим заполнением состояния с нулевым импульсом. Нельзя непосредственно применить используемое для ферми-систем разложение для S -матрицы, так как теорема о необходимости учитывать только связанные диаграммы не имеет места, если в диаграмме имеются линии частиц с нулевым импульсом (Беляев [23], Гугенгольд и Пайнс [24]). Для преодоления этой трудности было предложено несколько методов (Беляев [22, 23], Савада [91]), из которых, по моему мнению, самый простой предложен Гугенгольцем и мной [24]. Прежде всего прибавим к гамильтониану дополнительный член $-\mu N_{\text{орег}}$, а затем последуем рецепту Боголюбова, заменяя a_0^+ и a_0 на $\sqrt{N_0}$. Исходный гамильтониан приобретет, таким образом, вид (3.51). Теперь состояния с нулевым импульсом уже не приводят ни к каким трудностям, так как мы пренебрегли всеми динамическими эффектами, обусловленными этими состояниями. Таким образом, мы можем теперь использовать обычную процедуру, связанную с использованием S -матрицы, с тем существенным отличием, что вместо одной диаграммы, характеризующей взаимодействие, теперь появляется шесть различных их типов (фиг. 25). Здесь черными кружками обозначено взаимодействие, равное полусумме обменного и прямого взаимодействий (такое рассмотрение значительно упрощает исследование систем с короткодействующими силами). Детали вывода основных формул и правила для проведения вычислений с помощью теории возмущений можно найти у Гугенгольца и Пайнса [24].

17. Для бозе-системы уравнения Дайсона, к рассмотрению которых мы переходим, имеют совершенно особую структуру. Эта структура связана с совершенно иным характером членов взаимодействия, в



Фиг. 25.



Фиг. 26.

связи с чем уравнение Дайсона заменяется двумя уравнениями Беляева (фиг. 26):

$$G(p, \epsilon) = G_0(p\epsilon) + G(p\epsilon) \Sigma_{11}^- G_0(p\epsilon) + \\ + \tilde{G}(p, \epsilon) \Sigma_{02}(p, \epsilon) G_0(p\epsilon), \quad (3.68)$$

$$\tilde{G}(p\epsilon) = G_0(p\epsilon) \Sigma_{11}^- \tilde{G}(p\epsilon) + G_0(p\epsilon) \Sigma_{20} G(p\epsilon);$$

здесь Σ_{11} — неприводимая собственно энергетическая часть, которую мы уже ввели ранее; $\Sigma_{02} = \Sigma_{20}$ — новая собственно энергетическая часть, учитывающая новый тип взаимодействий, присутствующий в гамильто-

ниане (3.51); $G(p, \epsilon)$ — фурье-образ функции Грина

$$\begin{aligned} \tilde{G}(p, \tau) &= \langle \Psi_0 | T [a_p^+(0) a_{-p}^+(\tau)] | \Psi_0 \rangle = \\ &= \langle \Psi_0 | T [a_{-p}(\tau) a_p(0)] | \Psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Два уравнения (3.68) представляют собой простую алгебраическую систему, в результате решения которой имеем

$$\begin{aligned} G(p, \epsilon) &= \\ &= \frac{\epsilon + \epsilon(p) - \mu + \Sigma_{11}^-}{\left[\epsilon - \frac{\Sigma_{11}^+ - \Sigma_{11}^-}{2} \right]^2 - \left[\epsilon(p) - \mu + \frac{1}{2} (\Sigma_{11}^+ + \Sigma_{11}^-) \right]^2 + \Sigma_{02}^2}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

где

$$\Sigma_{11}^+ = \Sigma_{11}(p, \epsilon) \quad \text{и} \quad \Sigma_{11}^- = \Sigma_{11}(-p, -\epsilon).$$

18. Структура $G(p, \epsilon)$ для системы бозонов оказывается совсем другой, чем для системы фермионов. Гугенгольц и автор [24] смогли доказать, изучая член за членом в разложении теории возмущений, что

$$\Sigma_{11}(0, 0) - \Sigma_{02}(0, 0) = \mu. \quad (3.71)$$

Смысл этой теоремы заключается в том, что спектр квазичастиц не может начинаться с энергетической щели и что возбуждения квазичастиц при малых импульсах будут подчиняться линейному дисперсионному соотношению

$$\epsilon(p) = sp,$$

за исключением возможных патологических случаев.

Таким образом, мы видим, что предположение о макроскопическом заполнении состояния с нулевым импульсом непосредственно приводит к линейному дисперсионному соотношению для фононов, а следовательно (при использовании известного утверждения Ландау), и к понятию сверхтекучести. Справедливость этого утверждения зависит от обоснованности разложений в ряд теории возмущений.

19. С помощью техники суммирования, присущей теории поля, мы устранили расходимости в рядах

теории возмущений Рэля — Шредингера при малых значениях импульса передачи. Например, если в (3.70) учесть только случай слабого взаимодействия

$$\Sigma_{11} = \text{---} \times \text{---} = N_0(V_k + V_0),$$

$$\Sigma_{02} = \bullet \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} = N_0 V_k,$$

$$\mu = N_0 V_0,$$

то немедленно приходим к результатам теории Боголюбова. Находим

$$G(p, \epsilon) = \left[\frac{u_p^2}{\epsilon - \omega_p + i\delta} - \frac{v_p^2}{\epsilon + \omega_p - i\delta} \right], \quad (3.72)$$

где u_p , v_p и ω_p даются формулами (3.57) и (3.58). Таким образом, u_p измеряет величину сингулярности полюса типа свободной частицы, а v_p — величину сингулярности нового полюса, обусловленного конденсатом. Вычисления в пределе низкой плотности могут быть проведены также просто (без трудностей, связанных с возможным дублированием диаграмм). Для ознакомления с этими вычислениями, с вычислениями логарифмического члена в энергии основного состояния и поправок к спектру фононов я отсылаю читателя к оригинальным работам (Беляев [23], Гугенгольц и Пайнс [24]).

20. Имеется другой способ получения основного выражения (3.70), о котором я бы хотел упомянуть. Допустим, что вместо уравнений Беляева мы рассматриваем уравнение, «изображенное» на фиг. 27, в котором двойные линии означают истинные одночастичные функции Грина, а сплошные линии — одночастичные функции Грина «нормального состояния»

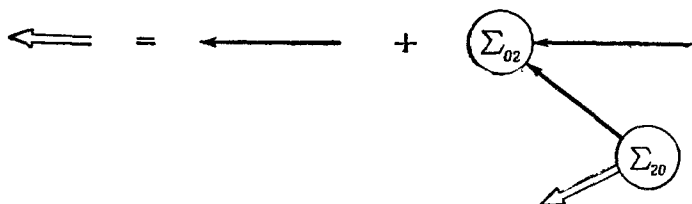
$$G_n(p, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon(p) - \Sigma_{11}(p, \epsilon) + i\delta}, \quad (3.73)$$

т. е. такие, в которые включены все собственно энергетические эффекты, связанные с одной входящей и

одной выходящей линиями. Тогда изображенное графически уравнение принимает форму

$$G = G_n^+ + G_n^+ G_n^- \Sigma_{02}^2 G = \frac{(G_n^-)^{-1}}{(G_n^- G_n^+)^{-1} + \Sigma_{02}^2}, \quad (3.74)$$

которая, как легко видеть, приводит к нашему прежнему результату (3.70). В самом деле, нетрудно заметить, сравнивая диаграммы уравнения Беляева и написанного выше, что оба уравнения должны быть



Фиг. 27.

идентичны. В некотором смысле уравнение (3.74) обещает раскрыть больше характерных черт рассматриваемой задачи, в частности, оно ясно показывает, что нам необходимо рассматривать совершенно последовательно только процессы взаимодействия пары частиц, которые связаны с переходами в конденсированное состояние и из него. Мы видим также, что отсутствие сохранения числа частиц проявляется только в промежуточных процессах.

21. Для бозонной системы низкой плотности можно вычислить фурье-образ $F(k\omega)$ функции Грина колебаний плотности. Первое приближение приводит к результатам, которые мы уже изложили для $S(k\omega)$. Вычисления в более высоких порядках пока еще не проведены. Эти вычисления представляют определенный интерес, так как вопрос о существовании в системе бозонов «чистых» коллективных возбуждений остается открытым. Таким образом, в общем случае можно было бы ожидать наличия полюсов у функции

$F(k\omega)$, связанных с возбуждением квазичастиц из конденсированного состояния. Такими полюсами могут быть только полюсы, соответствующие недавно наблюдавшимся в опытах по рассеянию нейтронов (Хиншоу и Вудз [86]) возбуждениям, как в области ротонного минимума, так и в фононной области, причем энергия ротонов и фононов в пределах экспериментальной ошибки совпадала с энергией квазичастиц, определенной на основе измерений удельной теплоемкости.

22. Разреженный бозе-газ не является хорошей моделью, соответствующей действительной ситуации в жидком He^4 , так как порядки области действия сил отталкивания и плотности таковы, что $nf_0^3 \gg 1$. Бракнер и Савада [81] предприняли попытку провести вычисления для промежуточных плотностей теми же приемами, которые использовались Бракнером для фермионов: функции Грина квазичастиц в промежуточных состояниях заменялись функциями Грина, связанными с бозонной t -матрицей, которую нужно было затем определить из системы самосогласованных уравнений. Их результаты находятся в блестящем качественном согласии с полученным экспериментальным спектром возбуждений. Однако результаты могут встретить серьезные возражения, так как Бракнер и Савада не учитывали поправки на размытие основного состояния вследствие взаимодействия частиц. Недавно Перри и Тер Хаар [90] показали, что размытие состояния с нулевым импульсом по сравнению с величиной, полученной в теории Бракнера — Савады, составляет около 270%. Затем они произвели вычисления с учетом этого размытия и нашли, что кривая зависимости энергии квазичастиц от импульса вообще не имеет перегиба, так что пропадает даже качественное согласие с экспериментом.

23. Мне бы хотелось сделать несколько кратких замечаний о дальнейшем развитии теории, к которому микроскопический формализм может подобрать ключи, а также упомянуть о соображениях, успешно использованных в вариационных расчетах Фейнмана [83] и Фейнмана и Козна [84] по спектру возбуждений

жидкого He^4 . Эти замечания заимствованы главным образом из статьи Миллера, Нозьера и Пайнса [89].

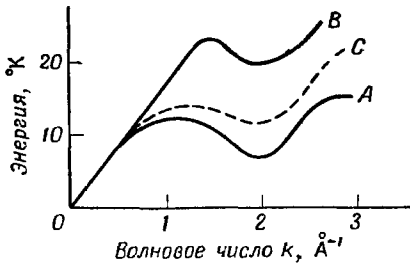
а. Спектр возбуждения Фейнмана непосредственно следует из предположения, что единичные возбуждения удовлетворяют нормировочному соотношению для $S(k\omega)$ и приводят к экспериментальному значению структурного фактора $S(k)$. Итак, если принять

$$S(k\omega) = NS(k) \delta[\omega - \omega(k)],$$

то сразу же получаем из (2.37), что

$$\omega(k) = \frac{k^2}{2mS(k)}; \quad (3.75)$$

это совпадает с результатом Фейнмана в случае пробной волновой функции $\rho_k|\Psi_0\rangle$.



Фиг. 28. Результаты расчета спектра возбуждений жидкого He^4 .

Кривая *A* получена экспериментально Хиншоу и Вудзом [86]; кривая *B* — результат Фейнмана [83]; кривая *C* — результат Фейнмана и Коэна [84].

б. Спектр возбуждений Фейнмана совпадает с экспериментальным спектром в фононной области, но не совпадает в ротонной области, как это видно из фиг. 28. В связи с этим можно заключить, что при коротких длинах волн спектральная плотность $S(k\omega)$ не может изображаться одной-единственной линией, а должна расщепляться вследствие взаимодействия между различными возбуждениями.

в. Фейнман и Коэн [84] выдвинули ряд положений, улучшающих использованную Фейнманом волновую функцию, приняв во внимание обратный поток, окру-

жающий данную частицу при ее движении через систему. С помощью этой усовершенствованной функции было получено значительно лучшее совпадение с опытом (фиг. 28).

г. Мы вынуждены подозревать, что обратный поток соответствует расщеплению величины $S(k\omega)$, которое происходит в результате взаимодействия между возбуждениями. Данное возбуждение может претерпевать виртуальные переходы в другие, и поэтому можно представить его окруженным совокупностью других возбуждений. Совокупность виртуальных возбуждений должна привести к уменьшению массы фейнмановского возбуждения (375), что занижает значение энергии этого возбуждения по сравнению с экспериментальной величиной.

д. Эта картина находит себе дополнительное подтверждение: исследование движения атома примеси через бозонную систему в приближении Боголюбова показывает, что совокупность виртуальных фононов, окружающих этот атом, образует точно такой же обратный поток, который предложили Фейнман и Коэн.

24. В заключение я хотел бы сказать несколько слов о роли сил притяжения в He^4 и вообще о силах притяжения в бозе-системах. Если предположить, что при малых значениях q взаимодействие V_q принимает отрицательное значение, то можно показать, что энергия квазичастиц, равно как и колебаний плотности, становится чисто мнимой; это свидетельствует о неустойчивости системы или о неправильных предпосылках проводимого вычисления. Так как эта неустойчивость проявляется при очень больших длинах волн, то может оказаться, что объем системы сожмется в точку ввиду положительности «эффективного» потенциала V_q^{eff} при малых импульсах передачи. Таким образом, я утверждаю, что конденсированное состояние может существовать только до тех пор, пока размер системы не достигнет величины, при которой длинноволновые фононы представляют собой устойчивые возбуждения. С другой стороны, кажется ясным, что силы притяжения играют существенную роль в определении коротко-олновых возбуждений в жидком He^4 ; эти силы,

безусловно, ответственны за наблюдаемую спектральную плотность и, возможно, во многом ответственны за поведение хода кривой элементарных возбуждений (перегиб вблизи минимума ротонів).

§ 4 ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

1. Понимание природы взаимодействия между электронами и фононами в нормальных металлах важно для получения надлежащего критерия существования сверхпроводимости. Более того, с энергетической точки зрения сверхпроводимость представляет собой небольшой, скорее тонкий эффект, налагающийся на обычные свойства электронов, поэтому теорию сверхпроводимости надо формулировать, исходя из наилучших решений для нормальных состояний системы с электрон-фононным взаимодействием (Бардин, Купер, Шриффер [28]). Конечно, электрон-фононное взаимодействие интересно и само по себе, как причина, обуславливающая сопротивление и затухание ультразвука в металлах. В этом параграфе я хотел бы сконцентрировать внимание на обсуждении типов коллективных возбуждений, эффективного электрон-фононного взаимодействия и эффективного электронного взаимодействия как для случая простых моделей, так и для случая реальных металлов.

2. Упрощенный исходный гамильтониан, описывающий электрон-фононное взаимодействие в металле, получен Бардиным и Пайнсом [25]. Его можно записать в форме:

$$H_1 = H_{el} + H_{ph} + H_{int} + H_{Coul}, \quad (3.76)$$

где

$$H_{el} = \sum_p \varepsilon(p) C_p^+ C_p, \quad (3.76a)$$

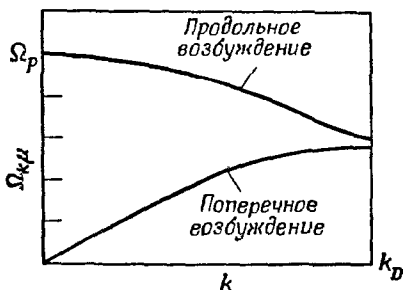
$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_k (p_k^+ p_k + \Omega_k^2 q_k^+ q_k), \quad (3.76b)$$

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_k q_k V_{k0-k}^i, \quad (3.76b)$$

$$H_{Coul} = \frac{1}{\Omega} \sum_{kpq} \frac{2\pi e^2}{k^2} C_{p+k}^+ C_{q-k}^+ C_q C_p. \quad (3.76г)$$

а. H_{el} описывает совокупность электронов, движущихся в периодическом поле ионной решетки; операторы C_k^+ и C_k являются операторами рождения и уничтожения блоховских волн, соответствующих электрону с энергией $\epsilon(k)$, движущемуся в периодическом потенциальном поле.

б. H_{ph} описывает нормальные колебания ионов на фоне однородного положительного заряда. Если учитывать только кулоновское взаимодействие, то частоты Ω_k подсчитываются непосредственно (Кон [98],



Фиг. 29.

Кларк [96], Колдуэл-Хорсфалл и Марадудин [58]). Сумма квадратов продольных и поперечных колебаний подчиняется простому нормировочному соотношению

$$\sum_{\mu} \Omega_{k\mu}^2 = \Omega_p^2 = \frac{4\pi n Z^2 e^2}{M}, \quad (3.77)$$

где M — масса, а Z — заряд отдельного иона. Дисперсионная зависимость для частот изображена на фиг. 29. Дисперсионная кривая для продольных колебаний должна начинаться в точке Ω_p (ионная плазменная частота), в то время как поперечные колебания имеют линейную дисперсионную зависимость вблизи $k = 0$, максимальное значение волнового вектора для фононов, равное k_D , определяется с помощью соотношения

$$\frac{k_D^3}{6\pi^2} = n.$$

Мы ограничимся рассмотрением в (3.76) продольных фононных колебаний, так как при больших длинах волн только эти фононы взаимодействуют с электронами.

в. H_{Int} описывает электрон-фононное взаимодействие. Если пренебречь влиянием периодического поля и учесть только кулоновское взаимодействие, то матричный элемент V_k^i выразится как

$$V_k^i = -\frac{4\pi Ze^2 i}{k} \left(\frac{n}{M}\right)^{1/2}. \quad (3.78)$$

Эффекты, связанные с периодичностью поля, оказываются вообще довольно важными. Например, процессы переброса (U-процессы), в которых электрон переходит из состояния p в состояние $p - k - K_n$, естественно, содержатся в выражении (3.76в), так как волновой вектор k , характеризующий колебания плотности и матричный элемент V_k^i , пробегает все значения, тогда как в случае фононов величина q_k при $k > k_D$ должна быть заменена на q_{k-K_n} , где K_n — вектор обратной решетки, переводящий волновой вектор фононов в разрешенную область, определяемую неравенством $k < k_D$. U-процессы играют важную роль в описании проводимости и в определении величины взаимодействия, носящего характер притяжения и приводящего к сверхпроводимости.

г. H_{Coul} — обычное кулоновское взаимодействие между электронами.

3. Энергии элементарных возбуждений и эффективное электронное взаимодействие в системе (3.76) были определены в приближении хаотических фаз Бардиным и Пайнсом [25] путем введения для плазмонов коллективных координат и использования ряда канонических преобразований. Их результаты можно получить несколько более простым способом, непосредственно используя выражение для диэлектрической проницаемости $\epsilon(k\omega)$ (Пайнс [99]) или уравнения движения для продольной составляющей диэлектрической проницаемости. Распространяя эти методы

непосредственно на наш случай, находим

$$\varepsilon(k\omega) = 1 + V_k \pi_0(k\omega) + V_k \pi_{\text{ion}}(k\omega), \quad (3.79)$$

где $\pi_0(k\omega)$ — введенная ранее поляризуемость для свободных электронов, а $\pi_{\text{ion}}(k\omega)$ — дополнительный вклад от ионной поляризуемости, определяемый соотношением

$$V_k \pi_{\text{ion}}(k\omega) = - \frac{\Omega_a^2}{\omega^2 - \Omega_0^2 + \Omega_a^2 + i\delta}, \quad (3.80)$$

где

$$V_k = \frac{4\pi e^2}{k^2} \quad \text{и} \quad \Omega_a^2 = \frac{(V_k^i)^2}{V_k}. \quad (3.81)$$

4. Спектр возбуждений имеет две ветви, определяемые условием $\varepsilon(k\omega) = 0$. Первая ветвь, соответствующая высокой частоте, является плазменным решением, которое мы уже рассматривали; в случае длинных волн ионная поляризуемость равна $-\Omega_p^2/\omega^2$, так что влияние ионов приводит к замене первоначальной частоты плазмонов ω_p на $(\omega_p^2 + \Omega_p^2)^{1/2}$, т. е. к поправке порядка m/M . Такое коллективное возбуждение называется *оптическим* (по аналогии с типами звуковых волн в полярных кристаллах), причем в нем колебания электронов и ионов не синфазны.

5. Вторая ветвь соответствует низкочастотным *акустическим* колебаниям, характеризующимся дисперсионным соотношением

$$\omega_a^2(k) = \Omega_0^2 - \Omega_a^2 + \frac{\Omega_a^2}{1 + \pi_0(k\omega) V_k}, \quad (3.82)$$

причем при таком возбуждении колебания электронов и ионов совпадают по фазе. При получении простой оценки величины $\omega_a(k)$ мы можем не учитывать периодическое поле решетки и найти

$$\Omega_0^2 \approx \Omega_a^2 \approx \Omega_p^2$$

и

$$\omega_a^2 \approx \frac{\Omega_p^2}{\varepsilon_{RPA}(k\omega)}. \quad (3.83)$$

Если использовать выведенное ранее выражение для $\epsilon_{RPA}(k\omega)$, то можно получить

$$\omega_a = \omega_1 + i\omega_2, \quad (3.84)$$

где

$$\omega_1^2 = \frac{\Omega_p^2}{1 + \frac{k_{FT}^2}{k^2}} = \frac{mZ}{3M} v_F^2 \frac{k^2}{1 + \frac{k_{FT}^2}{k^2}} = \frac{s^2 k^2}{1 + \frac{k_{FT}^2}{k^2}} \quad (3.85a)$$

и

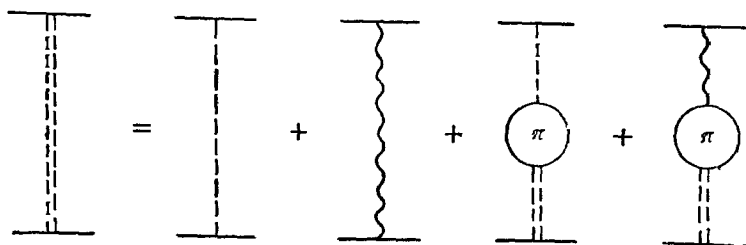
$$\omega_2 = -\frac{\pi}{4} \frac{m}{3M} \omega_1. \quad (3.85b)$$

Частота фонона при больших длинах волн, таким образом, уменьшается от величины Ω_p до sk в результате экранирования ионов движущимися электронами. Полученное выражение (3.85a) согласуется с результатом вычислений в приближении модели Томаса — Ферми (Бардин и Пайнс [25]) и с результатами, полученными с помощью уравнений движения (Бом и Стэйвер [94]). Вычисляемые на основе (3.85a) величины скоростей звука находятся в прекрасном соответствии с экспериментом. Если же использовать более точное выражение (3.82), в котором приняты во внимание эффекты периодического поля, можно получить хорошее соответствие со значениями модулей упругости щелочных металлов (Бардин и Пайнс [25]).

6. Мнимая часть фононной частоты возникает в результате учета возможности распада фонона на пару электрон — дырка. Эта величина измеряется непосредственно в опытах по затуханию ультразвука, и экспериментальные результаты вновь находятся в хорошем качественном согласии с этой простой теорией.

7. Результат (3.79) непосредственно получается с помощью техники теории поля, в которой учитывается влияние фононов на эффективное взаимодействие электронов. Уравнения Дайсона — Хаббарда заменяются на уравнение, представленное на фиг. 30, где волнистая линия означает функцию Грина свободных фононов $iD_0(k\omega)$; соединение этой линии с электронной линией соответствует матричному элементу — ig_k ;

кружком, как и раньше, обозначена сумма всех неприводимых поляризационных диаграмм для электронного газа — $i\pi(k\omega)$ при условии, что мы пренебрегаем



Фиг. 30.

влиянием на электронную поляризуемость поправок на фоновое взаимодействие, т. е. диаграммами типа



Обобщая утверждение Мигдала [26], можно показать, что порядок вклада от этой диаграммы составляет m/M , и, следовательно, ею можно пренебречь. Если для $\pi(k\omega)$ взять значение в приближении хаотических фаз $\pi_0(k\omega)$ и считать, что

$$g^2 = \frac{(V_k^l)^2}{2\Omega_0(k)}, \quad (3.86)$$

а

$$D_0(k\omega) = \frac{1}{\omega - \Omega_0 + i\delta} - \frac{1}{\omega + \Omega_0 - i\delta} \quad (3.87)$$

[ср. (2.48)], то сразу можно получить выражение (3.79) для диэлектрической проницаемости и величину эффективного взаимодействия между электронами.

8. Выражение для эффективного электронного взаимодействия можно преобразовать, если использовать дисперсионное соотношение для звуковых волн. Результирующее выражение значительно упрощается, если ограничиться случаем низких частот, воспользоваться приближением хаотических фаз, а затем произ-

вести замену $\pi_0(k\omega)$ на $\pi_0(k0)$. Тогда найдем

$$\frac{1}{\varepsilon(k\omega)} = \frac{1}{1 + V_k \pi_0(k, 0)} \left(1 + \frac{\omega_a^2 + \Omega_a^2 - \Omega_0^2}{\omega^2 - \omega_a^2} \right). \quad (3.88)$$

Первое слагаемое выражения в скобках соответствует экранированному кулоновскому взаимодействию, второе — связано с учетом эффектов фононного обмена (этот член идентичен выражению, полученному Бардиным и Пайнсом [25]).

9. Эффективное взаимодействие обладает следующими свойствами.

а. Если пренебречь эффектами, связанными с периодичностью, т. е. считать, что

$$\Omega_a^2 = \Omega_0^2 = \Omega_p^2,$$

то можно найти, что при нулевой частоте возбуждений взаимодействие равно нулю; для частот возбуждения, больших ω_a , оно имеет характер притяжения, для остальных случаев — отталкивания [расходимость в точке $\omega = \omega_a$, разумеется, не возникнет, если принять во внимание мнимую часть $\pi(k\omega)$]. Этот результат, впервые полученный Нозьером, см. [89], мог бы свидетельствовать о сверхпроводимости всех металлов.

б. Влияние периодичности на Ω_a и Ω_0 можно без особых трудностей учесть для щелочных металлов. Тогда находим, что $\Omega_a < \Omega_0$. Суммарное взаимодействие обладает следующими свойствами:

при $0 < \omega^2 < \Omega_0^2 - \Omega_a^2$ — отталкивание,

при $\Omega_0^2 - \Omega_a^2 < \omega^2 < \omega_a^2$ — притяжение,

при $\omega^2 > \omega_a^2$ — отталкивание.

Влияние такого взаимодействия на свойства сверхпроводимости щелочных металлов мы рассмотрим позднее.

в. Часть взаимодействия, связанная с фононным обменом и носящая характер притяжения, определяет, естественно, резонансную частоту всех систем,

которые будут рассмотрены ниже; это взаимодействие приводит к «контрэкранирующему эффекту», возникающему по той причине, что реакция системы превышает внешнее возмущение (и фактически стремится изменить его на обратное). После прохождения резонансного значения мы вновь встречаемся с обычными процессами экранирования, при которых реакция системы не может полностью скомпенсировать влияние внешнего воздействия.

г. Возможно, что все металлы попадут в категорию «а» или «б»; это нужно понимать в том смысле, что не может встретиться металл, для которого эффективное взаимодействие при нулевой частоте возбуждений носило бы характер притяжения. Как вначале подчеркивалось Нозьером, эта ситуация была бы несовместима с принципом причинности, а следовательно, привела бы к неустойчивости системы по отношению к длинноволновым колебаниям плотности. Такая неустойчивость означала бы, вообще говоря, только то, что система может менять свою пространственную конфигурацию до тех пор, пока длинноволновые колебания плотности не станут устойчивыми. Другими словами, если в результате вычислений получилось отрицательное значение $1/\epsilon(k, 0)$, то можно сделать вывод о несостоятельности этих вычислений и предпринять попытку более точно учесть влияние периодичности.

10. Электрон-фононное взаимодействие экранируется электронной диэлектрической проницаемостью ϵ_{RPA} , найденной в приближении хаотических фаз, т. е.

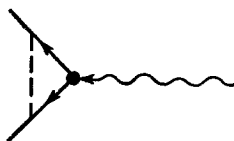
$$V^{\text{eff}}(k\omega) = \frac{V_k^i}{\epsilon_{RPA}(k\omega)}.$$

В высших порядках появятся связанные с экранированием поправки к результатам приближения хаотических фаз, а также поправки к вершинным частям, возникающие при учете электрон-электронного взаимодействия; простейшая из последних поправок имеет вид, изображенный на фиг. 31. Мигдал [26] показал, что поправки к вершинным частям, связанные с фононным обменом, типа показанного на фиг. 32, имеют порядок m/M , и поэтому ими можно пренебречь.

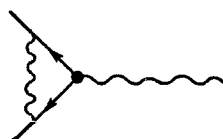
11. Энергию фононного возбуждения можно непосредственно получить из следующего уравнения:

$$\text{Double wavy line} = \text{Single wavy line} + \text{Single wavy line} \circlearrowleft \pi' \text{Single wavy line} \quad (3.89)$$

Двойная волнистая линия означает функцию $iD(k\omega)$, где $D(k\omega)$ — фурье-образ истинной фононной функции Грина $D(k, \tau)$. Оператор поляризации фононов $i\pi'(k\omega)$, который приводит к изменению величины



Фиг. 31



Фиг. 32.

энергии фонона и определяет конечное время жизни фонона, может быть с точностью до $\sim m/M$ записан в виде

$$\pi'(k\omega) = \frac{\pi(k\omega)}{1 + V_k \pi(k\omega)}, \quad (3.90)$$

где $\pi(k\omega)$ — сумма всех неприводимых электронных поляризационных диаграмм. Решая алгебраическое уравнение (3.89), находим, что

$$\omega_a^2(k) = \Omega_0^2 - \frac{V_k \pi(k\omega_a) \Omega_a^2}{1 + V_k \pi(k\omega_a)}; \quad (3.91)$$

этот результат непосредственно следует из (3.85).

12. Одним из интересных следствий (3.91) является эффект Кона. Кон [98] показал, что если поверхность Ферми имеет более или менее резкие очертания, то функция $\pi(k, \omega)$ при $k = 2k_F$ будет иметь логарифмическую расходимость, такую, что

$$\frac{\partial \pi}{\partial k} \rightarrow -\infty$$

(мы уже рассматривали одно из следствий этой сингулярности — эффект дальнего действия частицы примеси). В результате этого появится «отображение» поверхности Ферми в фоновом спектре, так как существует поверхность $\omega_a(k)$, для которой

$$|\text{grad}_k \omega(k)| = \infty,$$

причем положение последней поверхности определяется формой поверхности Ферми. Недавно Брокгауз и др. [95] сообщили об экспериментальном обнаружении эффекта Кона в опытах по рассеянию нейтронов на колебаниях решетки свинца.

13. Мигдал [26] решил задачу о взаимодействии электрона с фоновым полем с точностью до m/M , предполагая, что электрон-электронными взаимодействиями можно пренебречь. Он показал, что фоновые поправки к вершинному оператору $\Gamma(k\omega)$ оказываются порядка m/M . Следовательно,

$$(3.92)$$

Кроме того, для этой задачи фоновый поляризационный оператор $\pi'(k\omega)$ равен $\pi_0(k\omega)$ с точностью до m/M . Таким образом, Мигдал пришел к следующему выражению для собственно энергетической части:

$$(3.93)$$

где двойная линия означает истинную электронную функцию Грина, определяемую уравнением Дайсона

$$(3.94)$$

Получающееся в результате сопоставления (3.93) и (3.94) нелинейное уравнение имеет вид

$$\Sigma(p, \epsilon) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{D(k\omega) g_k^2}{\epsilon - \omega - \epsilon(p-k) - \Sigma(p-k, \epsilon - \omega)}. \quad (3.95)$$

Это уравнение соответствует суммированию всех электрон-фоонных собственно энергетических диаграмм, в которых никакие линии не пересекаются, а именно диаграмм, изображенных на фиг. 33, как это легко



Фиг. 33.

увидеть, сопоставляя графически (3.93) и (3.94). Далее Мигдал приступает к решению уравнения (3.95) для $\Sigma(p, \epsilon)$. Он находит затухание квазичастиц благодаря взаимодействию с фононами, которое изменяется, как η^3 , где η — энергия возбуждения, отсчитываемая от уровня Ферми, и поправку к эффективной массе, а следовательно, и к удельной теплоемкости электронного газа.

14. Результаты Мигдала можно при достаточном навыке распространить на более реальный случай, когда принимаются во внимание также электрон-электронные взаимодействия. Чтобы убедиться в этом, надо рассмотреть диаграммы, просуммированные нами в приближении хаотических фаз. Для фоонной собственно энергетической или поляризационной части мы получили выражение

$$\pi(k\omega) = \frac{\pi_0(k\omega)}{1 + V_k \pi_0(k\omega)}.$$

Заменим исходное взаимодействие V_k^i экранированным

$$\frac{V_k^i}{\epsilon_{RPA}(k\omega)},$$

где $\epsilon_{RPA}(k\omega)$ — электронная диэлектрическая проницаемость. Таким образом, получаем

$$(3.96)$$

Следовательно, мы могли бы включить эти взаимодействия в формулировку Мигдала, если бы исходили непосредственно из уравнения (3.95):

$$\Sigma(p, \epsilon) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \times$$

$$\times \frac{D_{RPA}(k\omega) \frac{(V_k^I)^2}{2\omega\epsilon(k\omega)}}{\epsilon - \omega - \epsilon(p-k) - \Sigma(p-k, \epsilon - \omega) + i\delta_{p-k}}. \quad (3.97)$$

Если же пренебречь эффектами периодичности, то мы легко найдем, что в формулировке Мигдала незранированная константа связи $\lambda_0 = 1/2$ (при кулоновском взаимодействии между электронами и ионами); таким образом, в данном приближении вычисления Мигдала можно легко обобщить.

15. В заключение необходимо подчеркнуть, что все положения настоящего параграфа относились исключительно к нормальным системам. Для случая сверхпроводников большинство полученных здесь результатов будет видоизменено.

§ 5 ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

1. Теория Бардина — Купера — Шриффера имела большой успех и в настоящее время настолько широко известна, что подробно рассматривать ее здесь не требуется. Бардин и Шриффер [101] написали подробный обзор современного состояния теории, включив сравнение с данными экспериментальных исследований; я отсылаю читателя к их статье, а также к оригинальной работе Купера [27]. В этом же параграфе я хотел бы рассмотреть явление сверхпроводимости

на основе последних достижений проблемы многих тел. В основном наше рассмотрение будет применимо к любой системе фермионов, взаимодействие между которыми носит характер притяжения. Мы рассмотрим следующие вопросы.

а. Неустойчивость нормального состояния ферми-систем, взаимодействие в которых носит характер притяжения.

б. Простой вариант вывода спектра квазичастиц на основе уравнений движения, предложенный Андерсоном и Шриффером.

в. Схема расширения обычной теоретико-полевой формулировки временной теории возмущений, которая приводит к теории Бардина — Купера — Шриффера и позволяет последовательно вычислять поправки к результатам этой теории.

г. Краткое рассмотрение коллективных возбуждений.

д. Критерий сверхпроводимости.

Многие новые результаты, о которых будет идти речь, получены мной совместно со Шриффером и содержатся в работе [110].

2. Ранние теории Фрелиха [97] и Бардина [93] представляли собой попытки связать свойства сверхпроводимости с *собственной энергией* электронов, взаимодействующих с фононным полем. Так было выдвинуто положение, что вследствие фононного взаимодействия энергетически более выгодным (с точки зрения суммы кинетической энергии электронов и собственной их энергии) будет несколько иной характер заполнения электронами сферы Ферми. Эти теории оказались безуспешными не только потому, что энергия взаимодействия получалась слишком большой, но главным образом из-за невозможности описать с их помощью эффект Мейснера или получить (после ее экспериментального открытия) энергетическую щель в спектре возбуждений квазичастиц.

3. Современная теория сверхпроводимости в качестве *исходного* момента рассматривает *взаимодействие* между электронами (взаимодействие, обусловленное фононным обменом, и экранированное кулоновское

взаимодействие). Если взаимодействие имеет характер притяжения (мы видели, что это наблюдается в металлах в определенном интервале частот), то, как показал Купер [27], обычное распределение по импульсам (сфера Ферми) становится неустойчивым по отношению к парным возбуждениям. Остановимся кратко на основных положениях Купера, пользуясь нашей системой обозначений. Рассмотрим систему частиц со следующим взаимодействием:

$$V(p - p') = -\lambda w_p w_{p'}, \quad (3.98)$$

где

$$w_p = \begin{cases} 1 & \text{при } \varepsilon(p_F) - \omega_m \leq \varepsilon(p) \leq \varepsilon(p_F) + \omega_m, \\ 0 & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases}$$

Таким образом, только те пары частиц, которые лежат в указанном выше интервале ω_m вблизи поверхности Ферми, могут взаимодействовать друг с другом. Мы будем рассматривать многократное рассеяние пары частиц друг на друге, лежащих в этом интервале. Для модели, характеризуемой потенциалом (3.98), уравнение для t -матрицы, (3.36), можно решить точно. В результате находим

$$t(pp'; q\omega) = -\frac{\lambda w_{p'} w_p}{1 + \lambda \varphi(q\omega)}, \quad (3.99)$$

где функцию $\varphi(q\omega)$ можно записать в виде

$$\varphi(q\omega) = \sum_{\mu} \frac{|(b_q^+)_{\mu 0}|^2}{\omega - \omega_{\mu 0} + i\delta} - \sum_{\mu} \frac{|(b_q)_{\mu 0}|^2}{\omega + \omega_{\mu 0} - i\delta}. \quad (3.100)$$

Мы ввели здесь операторы рождения и уничтожения пар частиц:

$$b_q^+ = \sum_q C_{\frac{q}{2}-p}^+ C_{\frac{q}{2}+p}^+, \quad b_q = \sum_p C_{\frac{q}{2}+p} C_{\frac{q}{2}-p}. \quad (3.101)$$

Частоты возбуждений $\omega_{\mu 0}$ для случаев рождения и уничтожения принимают соответственно значения

$$\pm [\varepsilon(q+p) + \varepsilon(q-p)].$$

В этом параграфе все энергии отсчитываются от уровня энергии поверхности Ферми. Выражение (3.100) мы представили в такой форме, чтобы подчеркнуть сходство между задачей распространения пар частиц и задачей распространения пар электрон — дырка [ср. (3.100) с выражением (2.40), вычисленным для случая плоских волн]. Заметим, что решение (3.99) можно получить сразу методом уравнений движения, рассматривая коммутаторы $[H, b_q]$ и $[H, b_q^+]$ и оставляя только члены, соответствующие повторному рассеянию пар частиц (Савада и Фукуда [52]).

Нас интересуют решения уравнения

$$1 + \lambda \varphi(q\omega) = 0 \quad (3.102)$$

относительно значений частот ω возбуждения пар. Если мы будем рассматривать уравнение (3.102) в пределе $q = 0$, а затем, следуя Куперу, сохраним вклад в $\varphi(0\omega)$ только от промежуточных состояний, соответствующих движению частиц [первый член (3.100)], то найдем $N - 1$ состояний с непрерывным положительным спектром энергии

$$\omega_{pq} = \varepsilon \left[\frac{q}{2} + p \right] + \varepsilon \left[\frac{q}{2} - p \right],$$

аналогичным непрерывному спектру состояний частица — дырка, следующему из дисперсионного соотношения приближения хаотических фаз

$$1 + \pi_0(k\omega) V_k = 0,$$

и одно состояние, которое лежит ниже упомянутого непрерывного спектра и соответствует энергии

$$\omega_r = -\omega_m e^{-1/2N(0)\lambda}, \quad (3.103)$$

где $N(0)$ — плотность состояний, приходящихся на единицу энергии, частиц с одинаковым спином; при этом мы предположили, что λ достаточно мало, так что

$$\omega_r \ll \omega_m.$$

Этот результат несовместим с условием стабильности сферы Ферми, требующим, чтобы химический потен-

циал μ был бы больше нуля; в данном же случае находим, добавляя к системе две частицы, что

$$\mu = -\frac{\omega_r}{2}.$$

Этот же результат можно получить более изящным способом, если использовать представление Лемана для функции $B(q\omega)$, являющейся фурье-образом функции Грина

$$B(q, \tau) = \langle \Psi_0 | T [b_q(\tau) b_q^+(0)] | \Psi_0 \rangle.$$

аналогичное представлению, использованному нами при рассмотрении $F(q\omega)$ и $F(q, \tau)$.

Если теперь учесть процессы рассеяния типа дырка — дырка (что впервые при рассмотрении уравнения (3.102) сделал Голдстоун), то можно найти, что состоянию, лежащему ниже упомянутого непрерывного спектра, теперь соответствуют два чисто мнимых решения уравнения (3.102):

$$\omega = \pm i\omega_r. \quad (3.104)$$

Эти решения также свидетельствуют о нарушении стабильности нормального распределения Ферми, так как теперь для функции распространения пары частиц $B(0, \tau)$ появляется решение, экспоненциально возрастающее во времени. Такой вывод не теряет силы при переходе к рассмотрению пар частиц с неравным нулю общим импульсом q ; скорость роста решения максимальна в случае $q = 0$ и уменьшается при увеличении q .

4. Представляет интерес изучить уравнение (3.102) в случае конечных температур (Каданов и Мартиц [105]). Переход к случаю конечных температур в выражении (3.100) можно осуществить с помощью естественного температурного обобщения для случая идеальной системы:

$$\begin{aligned} |(b_q^+)_{\mu 0}|^2 &\rightarrow f_{\frac{q}{2}+p} f_{\frac{q}{2}-p}, \\ |(b_q)_{\mu 0}|^2 &\rightarrow \left(1 - f_{\frac{q}{2}+p}\right) \left(1 - f_{\frac{q}{2}-p}\right). \end{aligned} \quad (3.105)$$

где f_p — функция распределения Ферми — Дирака, определяемая выражением

$$f_p = \frac{1}{e^{\beta \epsilon(p)} + 1}, \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

Уравнение (3.102) в случае $q=0$ заменится уравнением

$$1 + \lambda \varphi(0\omega) \operatorname{th} \frac{\beta \epsilon(p)}{2} = 0. \quad (3.106)$$

Далее находим, что по мере повышения температуры от $T=0$ нестабильность системы уменьшается, и, когда температура достигает значения T_c , наступает «критическая» устойчивость, т. е. при этом $\omega = 0$. При $T = T_c$ имеем

$$1 + \lambda \varphi(\omega) \operatorname{th} \frac{\beta_c \epsilon(p)}{2} = 0, \quad (3.107a)$$

или

$$1 = \lambda \sum_p \frac{(\omega_p)^2}{2\epsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\beta_c \epsilon(p)}{2}. \quad (3.107b)$$

Для $T > T_c$ не возникает неустойчивых решений уравнения (3.106). Результат (3.107b) совпадает с результатом, полученным Бардиным, Купером и Шриффером для критической температуры, однако они определили ее как температуру, при которой энергетическая щель обращается в нуль. Мы кратко ознакомимся с причиной этого совпадения.

5. Можно сказать, что нестабильность Купера является основным ключом понимания теории сверхпроводимости. Она указывает на некоторую выделенность частиц с противоположными спинами и импульсами в том смысле, что эти частицы имеют тенденцию образовывать в некотором роде связанные состояния. Это позволило Бардину, Куперу и Шрифферу произвести вычисления энергии основного состояния и спектра возбуждений с помощью выбора волновой

функции, учитывающей корреляции между такими парами частиц, а именно

$$\Psi = \prod_{p\sigma} [u_p + v_p C_{p\sigma}^+ C_{-p-\sigma}^+] |0\rangle, \quad (3.108)$$

где $|0\rangle$ — волновая функция вакуума, u_p^2 — вероятность того, что состояние данной пары $p\sigma$ и $-p-\sigma$ свободно, v_p^2 — вероятность того, что оно занято, $u_p^2 + v_p^2 = 1$. Заметим, что волновая функция (3.108) не соответствует системе с фиксированным числом частиц. Однако из этого затруднения легко выйти, если проводить вычисления для большого канонического ансамбля (добавив для этого к гамильтониану слагаемое $-\mu N$), а затем считать, что сохраняется среднее число частиц системы. Рассмотрим здесь несколько иной формализм, предложенный Андерсоном [32] и Шриффером [111], в котором используется метод уравнений движения.

6. Рассмотрим гамильтониан (2.62) и еще раз выпишем уравнение движения для оператора C_p^+ . Из (2.64) получаем (для единицы объема системы)

$$[H, C_{p\uparrow}^+] = \tilde{\varepsilon}(p) C_{p\uparrow}^+ - \sum_{\substack{k \neq 0 \\ k \neq q-p}} V_k C_{p+k\uparrow}^+ C_{q-k\sigma}^+ C_{q\sigma}, \quad (3.109)$$

где $\tilde{\varepsilon}(p)$ — энергия квазичастицы в приближении Хартри — Фока, измеренная относительно энергии частиц на поверхности Ферми, μ_{HF} — химический потенциал, соответствующий этому приближению. Теперь сохраним дополнительный вклад от тернарного члена в уравнении (3.109) и допустим, что для основного состояния в результате парных корреляций существует ненулевая вероятность

$$\langle \Psi_0 | C_q^+ C_{-q}^+ | \Psi_0 \rangle = h_q^+.$$

Такая ненулевая вероятность не может существовать для «нормальных» ферми-систем; предположим теперь, что она существует, а затем выясним последствия такого предположения. Допуская ее существо-

вание, мы с самого начала отказываемся от идеи сохранения числа частиц в промежуточных состояниях; сохранение среднего числа частиц еще обеспечивается, если положить $\langle N_{\text{oper}} \rangle = N$. Оправданием этому допущению служит куперовская нестабильность, из которой следует возможность существования виртуальных состояний связанных пар. Сделав это допущение, можно записать (3.109) в виде

$$[H, C_{p\uparrow}^+] = \tilde{\varepsilon}(p) C_{p\uparrow}^+ + \Delta_p^+ C_{-p\downarrow}, \quad (3.110a)$$

где

$$\Delta_p^+ = \sum_q V_{q-p} h_q^+. \quad (3.111a)$$

Аналогичным образом имеем

$$[H, C_{-p\downarrow}] = -\varepsilon(p) C_{-p\downarrow} + \Delta_p C_{p\uparrow}^+, \quad (3.110b)$$

$$\Delta_p = \sum_q V_{q-p} h_q = \sum_q V_{q-p} \langle \Psi_0 | C_{-q\downarrow} C_{q\uparrow} | \Psi_0 \rangle. \quad (3.111b)$$

Мы видим, что уравнение движения для $C_{p\uparrow}^+$ зависит от $C_{-p\downarrow}$, и наоборот. Решая эти уравнения совместно, получаем, что $C_{p\uparrow}^+$ и $C_{-p\downarrow}$ совершают колебания с частотой E_p , причем

$$E_p = \pm [\varepsilon_p^2 + \Delta_p^2]^{1/2}. \quad (3.112)$$

Остается нерешенной задача определения Δ_p .

Это можно сделать, если ввести соответствующие операторы рождения и уничтожения квазичастиц, а затем наложить условие, чтобы волновая функция основного состояния не противоречила волновой функции, соответствующей уравнениям движения; таким образом, дальнейшая процедура будет лишь некоторым обобщением описанной ранее. Рассмотрим операторы γ_p :

$$\begin{aligned} \gamma_{p0}^+ &= u_p C_{p\uparrow}^+ - v_p C_{-p\downarrow}, & \gamma_{p0} &= u_p C_{p\uparrow} - v_p C_{-p\downarrow}^+, \\ \gamma_{p1}^+ &= u_p C_{-p\downarrow}^+ + v_p C_{p\uparrow}, & \gamma_{p1} &= u_p C_{-p\downarrow} + v_p C_{p\uparrow}^+, \end{aligned} \quad (3.113)$$

которые удовлетворяют соответствующим перестановочным соотношениям, если

$$u_p^2 + v_p^2 = 1.$$

Заметим, что соотношения (3.113) являются в точности преобразованиями Боголюбова [29, 30]). Определим теперь u_p , v_p и Δ_p с помощью уравнений движения для γ_p , используя (3.110) и (3.111), а затем налагая условия

$$\begin{aligned}\gamma_{p0} |\Psi_0\rangle &= 0, \\ \gamma_{p1} |\Psi_0\rangle &= 0.\end{aligned}\quad (3.114)$$

После некоторых выкладок получаем

$$\begin{aligned}u_p^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_p}{E_p} \right), & h_p^+ &= u_p v_p = h_p, \\ v_p^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_p}{E_p} \right), & N_p &= v_p^2\end{aligned}\quad (3.115)$$

и условие самосогласованности,

$$\Delta_p = - \sum_q V_{q-p} \frac{\Delta_q}{2E_q}, \quad (3.116)$$

являющееся уравнением для энергетической щели в теории Бардина — Купера — Шриффера.

7. Подведем итог тому, что можно получить из теории Бардина — Купера — Шриффера с помощью метода уравнений движения.

а. В качестве исходного момента сделано радикальное, не основанное на теории возмущений предположение о существовании вероятности возбуждений связанных пар.

б. Квазичастицы представляются суперпозицией частиц и дырок с противоположными спинами, определяемой коэффициентами преобразования Боголюбова, к которому мы сразу приходим от допущения «а».

в. Спектр квазичастиц обладает энергетической щелью Δ_p , которая определяется условием самосогласованности (3.116). Для потенциала (3.98) в случае слабого взаимодействия имеем

$$\Delta = 2\omega_m \exp\left(-\frac{1}{N(0)\lambda}\right). \quad (3.117)$$

г. Энергия основного состояния может быть непосредственно определена с помощью различных методов; для случая слабого взаимодействия приходим к результату

$$E_0 = -2N(0)\omega_m^2 \exp\left(-\frac{2}{N(0)\lambda}\right), \quad (3.118)$$

который, очевидно, нельзя получить методом теории возмущений.

д. Разрыв на поверхности Ферми отсутствует; функция $N_p = v_p^2$ плавно меняется при прохождении $p = p_F$; далее, можно показать, что волновая функция основного состояния имеет вид (3.108).

е. Этот подход с помощью уравнений движения непосредственно связан с теоретико-полевым методом Горькова [31], который сходным образом расцеплял уравнения движения для соответствующих функций Грина.

8. Заметим, что как в силу неопределенности точного вида эффективного взаимодействия электронов в металлах, так и в силу существования некоторого закона соответственных состояний при вычислении свойств реальных сверхпроводников Бардин, Купер и Шриффер [28] ограничились простым потенциалом (3.98). В связи с этим они получили теорию с одним неизвестным параметром, которая, как мы уже говорили, согласуется с экспериментальными данными почти для всех интересующих нас свойств сверхпроводников.

9. Когерентные эффекты в этой теории возникают потому, что квазичастица представляет собой суперпозицию частиц с противоположными импульсами и спинами. В результате эти электроны появляются и пропадают одновременно, и поэтому для данных явлений вклады от них могут *интерферировать*. При взаимодействии системы с колебаниями плотности обнаруживаем интерференционное ослабление (например, в случае нулевого звука); интерференционное усиление проявляется в случае взаимодействия со «спиновыми волнами» (спин-ядерные эксперименты). Предсказания теории прекрасно согласуются с

опытом. Длина когерентности ξ_0 является также мерой действия корреляции между парами и приблизительно равна v_F/Δ (ее порядок примерно 10^{-4} см). В связи с этим представление о парах, образующих бозе-конденсат, является не вполне оправданным, так как размер пары невообразимо велик по сравнению со средним расстоянием между частицами.

10. Теперь можно задать вопрос: почему берутся пары частиц с противоположными спинами? Разве триплетные состояния с параллельными спинами не подойдут точно так же? Бардин, Купер и Шриффер заметили, что обменные члены в общем случае стремятся снизить величину матричных элементов и, следовательно, приводят к увеличению энергии в случае спаривания частиц с параллельными спинами. Можно привести и другие соображения в пользу образования пар с противоположными спинами. В известном смысле можно рассматривать потенциал $V(p - p')$ [см. (3.98)] как действительно существующий при условии, что мы имеем дело с системой низкой плотности, когда основным считается только s -волновое рассеяние для частиц вблизи поверхности Ферми, соответствующая длина рассеяния $f_0 = -\lambda m$. Тогда можно утверждать, что, хотя металлы и не являются системами с низкой плотностью, сходство все же достаточно, чтобы считать, что s -волновая, синглетная амплитуда парциальной волны, характеризующая притяжение, больше, чем триплетная вблизи поверхности Ферми; в этом случае нестабильность будет существеннее проявляться для частиц с противоположными спинами, и мы приходим к спариванию, заложенному в теории Бардина — Купера — Шриффера.

11. Нужно подчеркнуть, что основными членами взаимодействия частиц, ответственными за существование сверхпроводимости, будут те, которые соответствуют рассеянию частиц с противоположными спинами и импульсами. Хотя эти члены имеют пренебрежимо малый вес (порядка $1/N$) по сравнению с остальными, все же именно они определяют искомый эффект, потому что когерентные эффекты компенсируют

недостающие с чисто статистической точки зрения вклады. Бардин и Риккайзен [34] и Боголюбов [103, 104] показали, что решение теории Бардина — Купера — Шриффера для «приведенного» гамильтониана

$$H = \sum_p \epsilon(p) C_p^\dagger C_p + \sum_{pp'} \frac{1}{2} [V(p-p')] [C_{-p'}^+ C_{p'}^+ C_{p\uparrow} C_{-p\downarrow}] \quad (3.119)$$

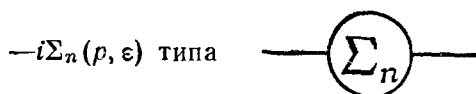
действительно является точным решением до членов порядка $1/N$.

12. Рассмотрим теперь, как можно было бы исследовать сверхпроводимость с помощью временной теории возмущений. Характер необходимого дополнения теории диктуется куперовской нестабильностью; в связи с этим нам необходимо допустить в некотором смысле образование связанных состояний, спариваний частиц с противоположными импульсами и спинами. Однако нам это необходимо сделать только для промежуточных состояний, так как в системе нет реальных связанных состояний. Далее, мы хотим построить на основе теоретико-полевых соображений теорию возмущений, в которой учитывались бы виртуальные связанные состояния частиц с противоположными спинами и импульсами. Этого можно достигнуть, если написать следующее уравнение для одночастичной функции Грина

(3.120)

где двойная линия означает истинную функцию Грина $iG(p, \epsilon)$, сплошная одинарная линия — функцию Грина «нормального состояния» $iG_n(p, \epsilon)$, в которую

включены все собственно энергетические процессы

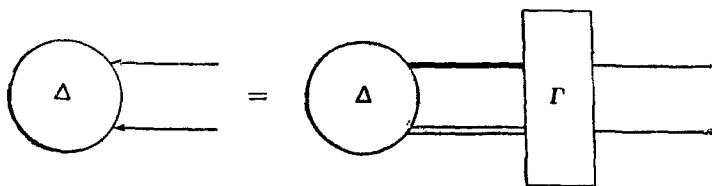


$$G_n = \frac{1}{\epsilon - \epsilon(p) - \Sigma_n(p, \epsilon) + i\delta_p}, \quad (3.121)$$

$-i\Delta(p, \epsilon)$ — амплитуда вероятности перехода пары частиц с противоположными спинами и импульсами в связанное промежуточное состояние, а $i\Delta^*(p, \epsilon)$ — амплитуда вероятности выхода пары частиц из этого состояния. Правила, которым подчиняются диаграммы уравнения (3.120), следуют из соответствующего обобщения теории матрицы рассеяния. Уравнение (3.120) имеет следующее решение:

$$\begin{aligned} G &= \frac{(G_n^-)^{-1}}{(G_n^+ G_n^-)^{-1} + \Delta^2} = \\ &= \frac{\epsilon + \epsilon(p) + \Sigma^- - \mu}{[\epsilon - \epsilon(p) - \Sigma^+ + \mu][\epsilon + \epsilon(p) + \Sigma^- - \mu] - \Delta^2 + i\delta}. \end{aligned} \quad (3.122)$$

Теперь возникает вопрос о подсчете величины $\Delta(p, \epsilon)$. Мы не можем использовать теорию возмущений, так как в каждом ее порядке для нормальных систем фермионов будем иметь $\Delta(p, \epsilon) = 0$. Таким образом, мы должны определить эту величину (учитывая условие совместности используемых уравнений), исходя из уравнения



$$(3.123)$$

где $-i\Gamma$ — сумма всех взаимодействий, характеризующих рассеяние пары частиц при условии, что мы должны исключить возможное дублирование диа-

грамм, так как в (3.120) и (3.123) автоматически уже просуммирован некоторый их класс. Несколько асимметричная форма уравнения (3.123), в котором промежуточное состояние определяется частично функцией G_n , частично истинной функцией Грина G , является прямым следствием запрещения двойного подсчета вкладов, так как использование одинаковых функций Грина привело бы к дублированию диаграмм.

13. Подведем итог некоторым свойствам системы уравнений (3.120) и (3.123).

а. Решение Бардина — Купера — Шриффера получается непосредственно, если в качестве взаимодействия взять взаимодействие типа (3.98) и считать величины $\Sigma^+ = \Sigma^-$ действительными. Это приближение эквивалентно пренебрежению эффектами, связанными с временем жизни квазичастиц и ренормализацией волновой функции нормального состояния квазичастиц, а также выбору простой формы эффективного взаимодействия между квазичастицами. Уравнение (3.123) приводит к уравнению для щели (3.116); функция Грина для сверхпроводника оказывается равной

$$G_{BCS} = \frac{u_p^2}{\epsilon - E_p + i\delta} + \frac{v_p^2}{\epsilon + E_p - i\delta}, \quad (3.124)$$

где u_p , v_p и E_p определяются формулами (3.112) и (3.115).

б. Структура функции Грина в выражениях (3.120) и (3.122) и функции Грина (3.124), полученной в теории Бардина — Купера — Шриффера, имеет большое сходство с функцией Грина для бозонной задачи. Существенная разница заключается в том, что для взаимодействующего бозе-газа можно было подсчитать величину Σ_{02} , применяя теорию возмущений, а для задачи сверхпроводимости такого решения с помощью теории возмущений не существует. Существенно, что Δ найдена «хитрым способом», с помощью которого удалось найти новое, самосогласованное решение, не связанное с теорией возмущений.

в. Уравнения (3.120) и (3.122) совпадают с уравнениями, предложенными Намбу [107] и Беляевым [102]; уравнения Беляева (найденные также Шриффером и мной [109]) по своей структуре идентичны уравнению (3.68) для бозонов; если расширить двухкомпонентную формулировку Намбу, мы вновь приходим к решению (3.122). Я полагаю, что форма уравнения (3.120) наиболее приближается по духу к оригинальному методу, принятому в теории Бардина — Купера — Шриффера: при попытке найти наилучшие возможные квазичастицы нормального состояния (т. е. функции Грина) получается новый, характеризующий только сверхпроводники эффект — возможность существования виртуальных состояний связанных пар.

г. Уравнения (3.122) и (3.123) допускают простой регулярный способ выхода за пределы теории Бардина — Купера — Шриффера следующим образом.

1) Рассмотрение функций Грина квазичастиц, соответствующих более реалистическим нормальным состояниям. Очевидно, что изменения в Σ_n , связанные с переходом от нормального состояния к сверхпроводящему, не сильно влияют на конечное уравнение для щели (3.123), в котором производится интегрирование по всем возможным промежуточным состояниям.

2) Рассмотрение более сложных операторов рассеяния Γ .

д. Изучение уравнений (3.120) и (3.123) показывает, что диаграммы, суммируемые в теории Бардина — Купера — Шриффера, таковы, что в них учитываются все процессы многократного рассеяния, соответствующие процессам образования состояний виртуальных связанных пар и процессам обратного перехода. Следовательно, было бы неправильным попытаться заменить Γ в уравнении (3.123) t -матрицей, так как такие диаграммы уже включены в уравнение, если мы возьмем даже $\Gamma = V$.

е. Исследуя уравнение (3.123), можно понять, почему вычисляемая в теории Бардина — Купера — Шриффера критическая температура соответствует температуре, при которой исчезает куперовская неста-

бильность. Если мы выделим из диаграмм t -матрицы часть, соответствующую «связанному состоянию», то можем записать уравнение

The diagram shows an equation between two representations of a t -matrix. On the left, a rectangular box labeled t has two horizontal lines extending to the right. On the right, an equals sign is followed by another rectangular box labeled t . From the right side of this box, two horizontal lines extend further to the right. The upper line is labeled G_0 above it, and the lower line is labeled G_0 below it. A vertical dashed line is drawn between the two boxes, and the space between them is labeled v .

(3.125)

которое, как легко видеть, согласуется с (3.102). Если же теперь определить критическую температуру как температуру, при которой $\Delta = 0$, то мы немедленно убедимся в соответствии уравнений (3.123) и (3.125), так как в этом случае в уравнении (3.123) функция G становится равной функции G_n .

14. Коллективные возбуждения в сверхпроводнике, пожалуй, проще всего рассчитать с помощью метода уравнений движения. Как показано впервые Андерсоном [32], вычисление можно провести способом, описанным в § 6 предыдущей главы в применении к движению пары частица — дырка (см. стр. 69). При этом необходимо потребовать существования ненулевых средних значений для комбинаций $C_p^+ C_{-p}^-$ и $C_{-p}^- C_p$ при проведении окончательной линеаризации. В результате этого пары частица — дырка оказываются связанными с парами $C_{p+k}^+ C_{-p}^+$ (пара частица — частица) и аналогичными комбинациями пар дырка — дырка. Решение получающейся системы уравнений для этих операторов определяет значения частот коллективных возбуждений. Коллективные возбуждения проявляются в двух видах: плазмоны, энергия которых лишь немного отличается от энергии плазмона в нормальном состоянии, и экситоны — элементарные возбуждения, соответствующие состояниям связанных пар, с энергией, лежащей в пределах энергетической щели. Энергия экситонных состояний в сильной

степени обуславливается угловой зависимостью взаимодействия квазичастиц; мы отсылаем читателя к оригинальной литературе (Андерсон [32], Риккайзен [33], Бардазис и Шриффер [100]) за дальнейшим ознакомлением с данными вопросами.

Коллективные возбуждения должны быть учтены при градиентно-инвариантном рассмотрении эффекта Мейсснера. Причина этого проста: изменение в калибровке вообще соответствует «продольному» воздействию на электроны; коллективные же возбуждения играют решающую роль в нахождении реакции системы на внешнее продольное поле (в чем мы уже ранее убедились). Каким образом коллективные возбуждения обеспечивают градиентно-инвариантное описание системы, можно проследить, помня указание Бардина на то, что реакция виртуальных плазменных полностью аннулирует эффекты, связанные с изменением калибровки. Обсуждение трудности, связанной с градиентной инвариантностью, и путей ее преодоления содержится в работах Андерсона [32], Боголюбова [103], Намбу [107], Пайнса и Шриффера [109, 110]. Возможно, наиболее полное и строгое доказательство градиентной инвариантности теории Бардина — Купера — Шриффера, учитывающей соответствующие коллективные возбуждения, содержится в статье Риккайзена [33].

15. Выбор критерия появления сверхпроводимости пока остается открытым. Ввиду серьезных трудностей, связанных с учетом времени жизни возбуждений при установлении этого критерия, и дополнительных усложнений, возникающих при учете периодической структуры потенциала (особенно U -процессов), наибольшее, что, кажется, можно сделать, — это объяснить, почему щелочные металлы — несверхпроводники (предполагая, что они таковы на самом деле). В этом случае положение не кажется безнадежным. Для этих металлов исследовано влияние периодической структуры на матричные элементы V_k^i (Бардин и др. [101]); как уже упоминалось, эффективное взаимодействие при низких частотах возбуждений имеет характер то отталкивания, то притяжения, то

снова отталкивания. При данных обстоятельствах кажется вполне физически оправданным, что если время жизни квазичастицы достаточно мало при тех частотах возбуждений, когда взаимодействие имеет характер притяжения, то состояние сверхпроводимости невозможно. Детальное исследование этого вопроса сводится к уяснению, насколько оправдана такая точка зрения.

16. С общей точки зрения, наиболее важный из нерешенных вопросов теории сверхпроводимости — это проблема построения модельного решения в том направлении, в котором оно проведено для теории сверхтекучести, т. е. еще надо показать, что теория Бардина — Купера — Шриффера верна для данной области плотностей, для данного класса взаимодействий и т. д. Можно ожидать, что это окажется слишком трудным, потому что (как уже говорилось) в сверхпроводящее состояние систему приводят процессы очень слабые с энергетической точки зрения. Самое большее, на что можно надеяться, это доказать, что при некоторых обстоятельствах все поправки к спектру возбуждений квазичастиц оказываются малыми. Подводя итоги, заметим, что, весьма вероятно, решения теории Бардина — Купера — Шриффера для любой модельной задачи такого рода окажутся справедливыми; остается только найти подходящую модель и доказать это.

ЛИТЕРАТУРА

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

1. Goldstone J., Proc. Roy. Soc., **A239**, 267 (1957). (Имеется перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)
Обоснование метода Бракнера в задаче многих тел.
2. Hubbard J., Proc. Roy. Soc., **A240**, 539 (1957). (Имеется перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)
Описание коллективных движений в системе многих частиц методами теории возмущений.
3. Галицкий В. Н., Мигдал А. Б., ЖЭТФ, **34**, 139 (1958).
Применение методов квантовой теории поля к проблеме многих тел.

ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ

4. Bohm D., Pines D., Phys. Rev., **92**, 609 (1953).
Кулоновское взаимодействие в вырожденном электронном газе.
5. Pines D., Phys. Rev., **92**, 626 (1953).
Электронное взаимодействие в металлах.
6. Gell-Mann M., Brueckner K. A., Phys. Rev., **106**, 364 (1957). (Имеется перевод в сб. ПСФ, № 1, 1958.)
Корреляционная энергия электронного газа высокой плотности.
7. Gell-Mann M., Phys. Rev., **106**, 369 (1957). (Имеется перевод в сб. ПСФ, № 1, 1958.)
Удельная теплоемкость вырожденного электронного газа высокой плотности.
8. Sawada K., Brueckner K. A., Fukuda N., Brout R., Phys. Rev., **108**, 507 (1957).
Корреляционная энергия электронного газа высокой плотности. Плазменные колебания.
9. Brout R., Phys. Rev., **108**, 515 (1957).
Корреляционная энергия электронного газа высокой плотности. Плазменные координаты.

10. Wentzel G., Phys. Rev., 108, 1593 (1957). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
 Диамагнетизм плотного электронного газа.
11. Hubbard J., Proc. Roy. Soc., A243, 336 (1957). (Имеется перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959)
 Описание коллективных движений в системе многих частиц методами теории возмущений. Корреляционная энергия свободного электронного газа.
12. Nozières P., Pines D., Phys. Rev., 111, 442 (1958).
 Корреляционная энергия свободного электронного газа.
13. Nozières P., Pines D., Nuovo Cimento, (X) 9, 470 (1958).
 Диэлектрическая формулировка проблемы многих тел: приложение к свободному электронному газу.
14. Ehrenreich H., Cohen M. H., Phys. Rev., 115, 786 (1959).
 Приближение самосогласованного поля в применении к проблеме многих тел.

СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ФЕРМИОНОВ

15. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, 30, 1058 (1956).
 Теория ферми-жидкости.
16. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, 32, 59 (1957).
 Колебания ферми-жидкости.
17. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, 35, 97 (1958).
 К теории ферми-жидкости.
18. Галицкий В. М., ЖЭТФ, 34, 151 (1958).
 Энергетический спектр неидеального ферми-газа.
19. Goldstone J., Gottfried K., Nuovo Cimento, (X) 13, 849 (1959).
 Коллективные возбуждения ферми-газов.

СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ БОЗОНОВ; ЖИДКИЙ ГЕЛИЙ

20. Боголюбов Н. Н., Journ. of Phys. (СССР), 11, 23 (1947).
 К теории сверхтекучести.
21. Lee T. D., Huang K., Yang C. N., Phys. Rev., 106, 1135 (1957).
 Собственные значения и собственные функции бозе-системы твердых сфер и ее свойства при низких температурах.

22. Беляев С. Т., ЖЭТФ, **34**, 417 (1958).
Приложение методов квантовой теории поля к бозе-системам.
23. Беляев С. Т., ЖЭТФ, **34**, 433 (1958).
Энергетический спектр неидеального бозе-газа.
24. Hugenholtz N. M., Pines D., Phys. Rev., **116**, 489 (1959).
Энергия основного состояния и спектр возбуждений системы взаимодействующих бозонов.

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

25. Bardeen J., Pines D., Phys. Rev., **99**, 1140 (1955).
Электрон-фононное взаимодействие в металлах.
26. Мигдал А. Б., ЖЭТФ, **34**, 1438 (1958).
Взаимодействие между электронами и колебания решетки в нормальных металлах.

ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

27. Соопер L. N., Phys. Rev., **104**, 1189 (1956).
Связанные пары электронов в вырожденном ферми-газе.
28. Bardeen J., Соопер L. N., Schrieffer J. R., Phys. Rev., **108**, 1175 (1957). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
Теория сверхпроводимости.
29. Боголюбов Н. Н., ЖЭТФ, **34**, 58 (1958).
Новый метод в теории сверхпроводимости.
30. Valatin J. G., Nuovo Cimento, (X) **7**, 843 (1958). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
Некоторые замечания по поводу теории сверхпроводимости.
31. Горьков Л. П., ЖЭТФ, **34**, 735 (1958).
Об энергетическом спектре сверхпроводников.
32. Anderson P. W., Phys. Rev., **112**, 1900 (1958). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
Приближение хаотических фаз в теории сверхпроводимости.
33. Rickayzen G., Phys. Rev., **115**, 795 (1959).
Коллективные возбуждения в теории сверхпроводимости.

34. Bardeen J., Rickayzen G., Phys. Rev., **118**, 936 (1960).
Энергия основного состояния и функция Грина для преобразованного гамильтониана в теории сверхпроводимости.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

35. Bloch C., Nucl. Phys., **7**, 451 (1958). (Имеется перевод в сб. ПСФ, № 6, 1958.)
36. Боголюбов Н. Н., УФН, **67**, 549 (1959).
37. Боголюбов Н. Н., Зубарев Д. Н., ЖЭТФ, **28**, 129 (1955).
38. Бриескнер К. А., в книге «The Many-Body Problem», New York, 1959. (Готовится русский перевод: Бракнер К. А., Теория ядерной структуры)
39. DuBois D. F., Ann. Phys., **7**, 174 (1959).
40. Hugengoltz N. M., Physica, **23**, 481 (1957). (Имеется перевод в сб. ПСФ, № 3, 1958.)
41. Hugengoltz N. M., в книге «The Many-Body Problem», New York, 1959. (Готовится русский перевод: дополнение к книге Бракиера, см. [38]).
42. Hugengoltz N. M., Van Hove L., Physica, **24**, 363 (1958). (Имеется перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959)
43. Jastrow R., Phys. Rev., **98**, 1479 (1955).
44. Klein A., Phys. Rev., **121**, 950 (1961).
45. Klein A., Prange R., Phys. Rev., **112**, 994 (1958). (Имеется перевод в сб. ПСФ, № 3, 1959.)
46. Kohn W., Luttinger J., Phys. Rev., **118**, 41 (1960).
47. Lipkin H., Ann. Phys., **9**, 272 (1960).
48. Luttinger J. M., Phys. Rev., **121**, 942 (1961).
49. Luttinger J., Ward J. C., Phys. Rev., **118**, 1417 (1960).
50. Martin P. C., Mermin D., будет опубликовано.
51. Martin P. C., Schwinger J., Phys. Rev., **115**, 1342 (1959). (Имеется перевод. Мартин Р. и Швингер Ю., Теория систем многих частиц, ИЛ, 1962.)
52. Sawada K., Fukuda N., Progr. Theor. Phys., **25**, 653 (1961).
53. Suhl H., Werthamer N. R., Phys. Rev., **122**, 359 (1961).
54. Tomonaga S., Progr. Theor. Phys., **13**, 467 (1955).

55. Van Hove L., Phys. Rev., **95**, 249 (1954).

56. Van Hove L., Physica, **26**, 200 (1960).

СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ

57. Carr W. J., Phys. Rev., **122**, 1437 (1961).

58. Coldwell-Horsfall R., Maradudin A. A., Journ. Math. Phys., **1**, 395 (1960).

59. Daniel E., Vosko S., Phys. Rev., **120**, 2041 (1960).

60. DuBois D. V., Ann. Phys., **8**, 24 (1959).

61. Glick A. J., Ferrell R. A., Ann. Phys., **11**, 359 (1960).

62. Langer J., Vosko S. J., Phys. Chem. Solids, **12**, 196 (1960).

63. Lindhardt J., Kgl. Danske Vidensk. Selskab., Mat.-fys. Medd., **28**, 8 (1954).

64. Nozières D., Pines D., Phys. Rev., **113**, 1254 (1959).

65. Pines D., Rev. Mod. Phys., **28**, 184 (1956).

66. Pines D., Physica, **26**, 103 (1960).

67. Quinn J. J., Ferrell R. A., Phys. Rev., **112**, 812 (1958).

68. Sawada K., Phys. Rev., **106**, 372 (1957). (Имеется перевод в сб. ПСФ, № 1, 1958.)

69. Wigner E. P., Phys. Rev., **46**, 1002 (1934).

70. Wigner E. P., Trans. Farad. Soc., **34**, 678 (1938).

СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ФЕРМИОНОВ

71. Абрикосов А. А., Халатников И. М., Усп. физ. наук, **22**, 329 (1959).

72. Brueckner K. A., Gammel J. L., Phys. Rev., **109**, 1023 (1958); **109**, 1040 (1958).

73. De Dominicis C., Martin P. C., Phys. Rev., **105**, 1417 (1957).

74. Gottfried K., Pičman L., Kgl. Danske Vidensk. Selskab., Mat.-fys. Medd., **32**, 13 (1960).

75. Lee T. D., Yang C. N., Phys. Rev., **117**, 12 (1960).

76. Overhauser A. W., Phys. Rev. Lett., **4**, 341 (1960).

ЯДЕРНАЯ СТРУКТУРА

77. Baranger M., Phys. Rev., **120**, 957 (1960).

78. Беляев С. Т., Kgl. Danske Vidensk. Selskab., Mat.-fys. Medd., **31**, 11 (1959).

79. Brown G. E., Thouless D., Physica, **26**, 145 (1960).

80. Mottelson B. R., в книге «The Many-Body Problem», New York, 1959.

СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ БОЗОНОВ И ЖИДКИЙ ГЕЛИЙ

81. Brueckner K. A., Sawada K., Phys. Rev., **106**, 1117 (1957); **106**, 1128 (1957).
82. Cohen M., Feynman R. P., Phys. Rev., **107**, 13 (1957).
83. Feynman R. P., Phys. Rev., **94**, 262 (1954).
84. Feynman R. P., Cohen M., Phys. Rev., **102**, 1189 (1956).
85. Элиашберг, ЖЭТФ, **39**, 1437 (1960).
86. Henshaw D. G., Woods A. D., Phys. Rev., **121**, 1266 (1961).
87. Ландау Л. Д., Journ. of Phys. (СССР), **5**, 71 (1941); **11**, 91 (1947).
88. Lee T. D., Yang C. N., Phys. Rev., **112**, 1419 (1958).
89. Miller A., Nozières P., Pines D., Phys. Rev., **127**, 1452 (1962).
90. Parry W. E., Ter Haar D., будет опубликовано.
91. Sawada K., Phys. Rev., **116**, 1344 (1959).
92. Wu T. T., Phys. Rev., **115**, 491 (1959).

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

93. Bardeen J., Phys. Rev., **52**, 688 (1937).
94. Bohm D., Staver T., Phys. Rev., **84**, 836 (1952).
95. Brockhouse B. N., Rao K. R., Woods A. D. B., Phys. Rev. Lett., **7**, 93 (1961).
96. Clark C. B., Phys. Rev., **109**, 1133 (1958).
97. Fröhlich H., Proc. Roy. Soc., **A215**, 291 (1952). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
98. Kohn W., Phys. Rev. Lett., **2**, 393 (1952).
99. Pines D., Le problème à N corps, Paris, 1959. (Перевод приводится в дополнении к настоящему изданию, см. стр. 159.)

ТЕОРИЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

100. Bardasis A., Schrieffer J. R., Phys. Rev., **121**, 1050 (1961).
101. Bardeen J., Schrieffer J. R., Progr. Low Temp. Phys., **3**, 170 (1961), (Имеется перевод: Бардин Дж., Шрифф-

- фер Дж., Новое в изучении сверхпроводимости, ИЛ, 1962).
102. Беляев С. Т., *Physica*, **26**, 181 (1960).
 103. Боголюбов Н. Н., *Physica*, **26**, 1 (1960).
 104. Боголюбов Н. Н., Толмачев В. В., Ширков Д. В., Новый метод в теории сверхпроводимости, М., 1958.
 105. Kadanoﬀ L., Martin P. C., *Phys. Rev.*, **124**, 670 (1961).
 106. Morel P., *Phys. Chem. Solids*, **10**, 277 (1959).
 107. Nambu Y., *Phys. Rev.*, **117**, 648 (1960).
 108. Pines D., *Phys. Rev.*, **109**, 280 (1958). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
 109. Pines D., Schrieffer J. R., *Nuovo Cimento*, **10**, 496 (1958). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
 110. Pines D., Schrieffer J. R., *Phys. Rev.*, **125**, 804 (1962).
 111. Schrieffer J. R., *Physica*, **26**, 124 (1960).

ДОПОЛНЕНИЕ

ЭЛЕКТРОНЫ, ПЛАЗМОНЫ и ФОНОНЫ¹⁾

§ 1. ВВЕДЕНИЕ

В этой работе я намерен обсудить характерные физические особенности, а также методы формального исследования двух идеализированных задач: газа свободных электронов и системы электронов и ионов, взаимодействующих по закону Кулона. Газ свободных электронов является идеализированной моделью для описания движения электронов в металле, моделью, в которой действие положительных ионов заменено однородным фоном положительного заряда. Влияние существующего в металлах периодического потенциала, создаваемого ионной решеткой, во многих случаях оказывается малым, и изложенные ниже методы можно простым образом распространить на более реальный случай. Пренебрежение периодическими эффектами для электронно-ионной системы является довольно-таки сильной аппроксимацией, справедливость которой мы и обсудим.

Бракнер уже обсудил многие свойства электронного газа, а Бом собирается рассмотреть еще и ряд других. Поэтому я ограничу свое рассмотрение следующими вопросами.

1. Обсуждение общих особенностей проблемы, которые проявляются уже при рассмотрении колеба-

¹⁾ Лекция, прочитанная Д. Пайнсом в летней школе теоретической физики в Лезуш (Франция) и опубликованная в сборнике *The Many-Body Problem, London — Paris — New York, 1959.* — *Прим. ред.*

ний плотности электронного газа методом уравнений движения [1].

2. Краткое изложение «диэлектрического» формализма в проблеме многих тел и его приложение к газу свободных электронов [2].

3. Обсуждение справедливости приближения хаотических фаз [3].

Таким образом, я не буду разбирать во всех деталях работы Гелл-Манна и Бракнера [4], Савады и др. [5, 6] по электронному газу высокой плотности, а также теорию Бома и Пайнса [7], основанную на введении дополнительной системы коллективных переменных (см. также [14] и [15]).

При рассмотрении поведения системы взаимодействующих электронов и ионов мы покажем, следуя ранней работе Бардина и Пайнса [8], что диэлектрический формализм применим к этой задаче и позволяет описать систему с помощью нормальных коллективных возбуждений — фононов и плазмонов. Более того, в приближении хаотических фаз мы сможем непосредственно определить, что соответствует эффективному взаимодействию между электронами в системе. Этот результат также находится в согласии с полученным в работе [8], однако мы не будем делать предположения о слабости электрон-фононного взаимодействия. Таким образом, это может служить достаточным оправданием выбора исходного гамильтониана, используемого Бардиным, Купером и Шриффером в теории сверхпроводимости [9]. Ниже мы рассмотрим только свойства электронно-ионных систем в приближении хаотических фаз и не будем затрагивать вопросов сверхпроводимости.

§ 2. СВОБОДНЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ГАЗ

Гамильтониан системы свободных электронов можно записать в виде

$$H_0 = \sum_l \frac{p_l^2}{2m} + \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_k^* \rho_k - n), \quad (1)$$

где

$$\rho_k = \int \rho(x) e^{-ikx} dx = \sum_i e^{-ikx_i}$$

— фурье-компонента плотности электронов, а n — однородный положительный фон, введение которого делает систему электрически нейтральной. Таким образом $n = \rho_0$ представляет собой плотность частиц. Исходя из выражения для фурье-компоненты плотности ρ_k , мы можем легко получить уравнение движения:

$$\ddot{\rho}_k = - \sum_i \left(\frac{k p_i}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m} \right)^2 e^{-ikx_i} - \sum_{k'} \frac{k' k}{m} \frac{4\pi e^2}{k'^2} \rho_{k-k'} \rho_{k'} \quad (2)$$

Первый член этого уравнения определяется характерными частотами газа невзаимодействующих частиц. Второй — можно разбить на две части:

а) слагаемые, в которых $k' = k$, соответствующие вкладу

$$\frac{4\pi e^2 n}{m} \rho_k;$$

б) слагаемые, в которых $k' \neq k$.

Приближение хаотических фаз состоит в пренебрежении именно последними слагаемыми ($k' \neq k$), представляющими собой взаимодействие между различными фурье-компонентами плотности. Физически это соответствует длинноволновому приближению, которое справедливо потому, что величина

$$\rho_{k'-k} = \sum_i e^{i(k'-k)x_i} \quad \text{при } k' \neq k$$

много меньше величины $\rho_0 = n$, пока мы имеем дело с большими длинами волн и считаем, что частицы распределены более или менее хаотически (в задачах, для которых существенно многократное рассеяние, например для газа, молекулы которого можно представить в виде твердых сфер, приближение хаотических фаз можно считать применимым при условии предварительной замены эффективного взаимодей-

ствия V_k соответствующей t_h -матрицей). В действительности, даже если считать электроны распределенными в периодической решетке, приближение хаотических фаз будет вполне законным, если k находится внутри первой зоны обратной решетки. Таким образом, можно надеяться, что эта аппроксимация справедлива в значительной области длин волн вплоть до значений k порядка обратного расстояния между частицами. В приближении хаотических фаз уравнение движения (2) принимает вид

$$\ddot{\rho}_k = - \sum_l \left(\frac{k p_l}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m} \right)^2 e^{-i k x_l} - \omega_p^2 \rho_k,$$

где

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$$

— квадрат плазменной частоты для свободных электронов. Чтобы оценить относительную величину членов правой части этого уравнения, заменим первое слагаемое его приближенным значением, равным $-k^2 v_0^2 \rho_k$, где v_0 — скорость электрона на поверхности Ферми. Тогда для $k < \omega_p/v_0$ компонента ρ_k удовлетворяет уравнению колебаний

$$\ddot{\rho}_k + \omega_p^2 \rho_k = 0. \quad (3)$$

Таким образом, фурье-компоненты плотности подобны совокупности осцилляторов с собственной частотой ω_p , которая для выбранных длин волн велика по сравнению с характеристическими частотами возбуждений ($\omega_{\text{ind}} = kv_0$) отдельных электронов. Квантованные коллективные возбуждения, связанные с колебаниями системы, называются плазмонами. Появление этих новых элементарных возбуждений является одним из наиболее характерных проявлений той роли, какую играет в электронном газе кулоновское взаимодействие.

Вторым важным его проявлением, как это будет ясно из последующего рассмотрения, является возникновение экранирования эффективного взаимодей-

ствия электронов. Заметим, что для всех значений плотности электронного газа в металлах

$$\hbar\omega_p > E_F,$$

где E_F — энергия электрона на поверхности Ферми. Следовательно, плазмоны не могут возбуждаться отдельными электронами, тем более теми, которые обладают тепловыми скоростями. Поэтому гамильтониан (1) можно представить в виде

$$H_0 = \sum_l \frac{p_l^2}{2m} + \sum_{k > k_c} \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_k^* \rho_k - n) + \sum_{k < k_c} \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_k^* \rho_k - n), \quad (4)$$

где $k_c \sim \omega_p/v_0$ — волновой вектор, для которого характеристическая энергия индивидуального возбуждения частицы сравнима с энергией плазмона. Тогда для значений $k < k_c$ величины ρ_k , согласно (3), представляют координаты плазмонов, которым соответствует в энергии системы постоянный член (нулевая энергия плазмонов). Другими словами, первые два члена выражения (4) представляют динамическую часть гамильтониана и описывают совокупность электронов, взаимодействующих через экранированный кулоновский потенциал с радиусом действия k_c^{-1} . Дальнодействующая часть кулоновского взаимодействия скомпенсирована коллективными возбуждениями высокой частоты. Это обстоятельство приводит к экранированию эффективного взаимодействия электронов.

Отношение квадратов энергий индивидуального возбуждения частицы к энергии возбуждения плазмона

$$g^2 \approx \frac{k^2 v_0^2}{\omega_p^2}$$

характеризует связь между кинетическим движением частиц и плазменными коллективными возбуждениями с частотой ω_p в приближении хаотических фаз,

Приведенные выше соображения позволяют ограничиться при подсчете энергии основного состояния системы низшим порядком относительно этой величины. Энергия, соответствующая вкладу от k -й фурье-компоненты кулоновского взаимодействия, заменится выражением

$$\frac{\hbar\omega_p}{2} - \frac{2\pi ne^2}{k^2},$$

представляющим собой разность между нулевой энергией плазмонов и собственно энергией взаимодействия зарядов. *Корреляционная энергия* определяется как разность между выражениями, найденными в приближении Хартри—Фока и в каком-либо более точном приближении. Возникновение такой терминологии связано с тем, что в приближении Хартри—Фока среднее значение энергии определяют по отношению к детерминанту Ψ_0 , составленному из плоских волн, и тем самым пренебрегают вкладом в энергию системы за счет обусловленных кулоновским взаимодействием корреляций положений частиц. Это взаимодействие заставляет электроны находиться на больших расстояниях друг от друга, чем те, которым соответствует волновая функция типа Ψ_0 , и, таким образом, приводит к понижению энергии системы. Вклад в корреляционную энергию от k -й фурье-компоненты потенциала взаимодействия будет равен

$$\begin{aligned} \frac{\hbar\omega_p}{2} - \frac{2\pi ne^2}{k^2} - \langle \Psi_0^* | \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_k^* \rho_k - n) | \Psi_0 \rangle = \\ = \frac{\hbar\omega_p}{2} - \frac{2\pi e^2}{k^2} \langle \Psi_0^* | \rho_k^* \rho_k | \Psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Мы подсчитали энергии элементарных возбуждений и энергию основного состояния в первом порядке по g^2 . Более полный расчет энергии плазмона можно провести непосредственно, используя уравнения движения. Чтобы получить ее, разобьем ρ_k на две части:

$$\rho_k = q_k + \eta_k,$$

где q_k — коллективная часть, определяемая как та часть ρ_k , которая удовлетворяет уравнению колеба-

ний в приближении хаотических фаз. Тогда можно показать [6], что существует набор q_k , удовлетворяющий уравнению движения вида

$$\ddot{q}_k + \omega^2 q_k = 0,$$

причем величина ω^2 определяется дисперсионным соотношением

$$1 = \frac{4\pi e^2}{m} \sum_l \frac{1}{\left(\omega - \frac{k p_l}{m}\right)^2 - \frac{\hbar^2 k^4}{4m^2}}, \quad (6a)$$

и ее можно представить в виде разложения по степеням g^2 :

$$\omega^2 \approx \omega_p^2 + \frac{3}{5} k^2 v_0^2 + \dots \quad (6b)$$

Этот метод дает поправку к члену $\sim g^2$ в записанном выше выражении для энергии и соответствует увеличению энергии плазмона.

Это, пожалуй, все, что можно получить, применяя только уравнения движения. Чтобы пойти дальше, можно воспользоваться двумя методами. В методе Бома — Пайнса для описания коллективных возбуждений, плазмонов, явно вводится дополнительная система координат. Это делается с помощью добавления к гамильтониану (1) определенных членов, таких, чтобы энергия основного состояния, соответствующая новому гамильтониану, имела бы то же значение, что и для исходной системы [7]. Так, одна из промежуточных форм его имеет вид

$$H = \sum_l \frac{p_l^2}{2m} + \sum_{k < k_c} \left\{ \frac{P_k^* P_k}{2} + \omega_p^2 \frac{Q_k^* Q_k}{2} - \frac{2\pi n e^2}{k^2} \right\} + H_{\text{int}} + \sum_{k > k_c} \frac{2\pi e^2}{k^2} \exp i k (x_i - x_j) + U. \quad (7)$$

Здесь Q_k и P_k — координаты и импульсы плазмона, H_{int} описывает линейное взаимодействие между плазмонами и отдельными электронами, а U представляет нелинейное взаимодействие между электронами и плазмонами, которым в приближении хаоти-

ческих фаз можно пренебречь. Взаимодействие между электронами и плазмонами, описываемое H_{int} , характеризуется константой порядка g^2 . В первом порядке по g^2 (который означает полное пренебрежение H_{int}) из соотношения (7) можно получить выражение для энергии, совпадающее с выражением (5). Последовательный учет поправок, обусловленных частью H_{int} , приводит к новому дисперсионному соотношению для плазмонов (6a) и экранированию взаимодействия между электронами. Вклад в энергию от этого экранированного взаимодействия можно оценить в рамках приближения хаотических фаз и тем самым учесть вклад от отдельных частиц в корреляционную энергию при малых импульсах передачи k .

Отметим, что в такой формулировке мы явно рассматриваем как индивидуальные частицы, так и коллективные возбуждения. Плазмоны описываются довольно просто, и обусловленные ими эффекты учитываются непосредственно. Недостатки формулировки Бома — Пайнса проявляются в описании возбужденных состояний. Рассматриваемая система имеет слишком много степеней свободы, поэтому можно наложить ряд дополнительных условий, связывающих коллективные и индивидуальные возбуждения, которые, как оказывается, накладывают ограничение на спектр частиц только в области, где плазмоны являются строго определенными элементарными возбуждениями. Однако этим дополнительным условиям довольно трудно удовлетворить на практике. Профессор Бом детально обсудит этот вопрос в своих лекциях [15].

Метод Савады и др. [5, 6] тесно связан с использованием рассматривавшихся выше уравнений движения. Этот метод ограничен приближением хаотических фаз и эквивалентен описанию системы исключительно с помощью нормальных координат q_k , которые подчиняются уравнению колебаний с частотой, определяемой соотношением (6a). Однако заметим, что если не ограничиваться главными значениями дисперсионного соотношения, то для него существует совокупность из $(N - 1)$ корней, соответствующих индивидуальным одночастичным возбуждениям, наряду

с плазменными возбуждениями, которые лежат над областью индивидуальных возбуждений, если только $k < k_c$. Энергию системы можно вычислить в приближении хаотических фаз. Результат такого подсчета для малых k соответствует величине, полученной на основе формулировки Бома — Пайнса, и тем самым полностью подтверждает законность пренебрежения в теории Бома — Пайнса дополнительными условиями при вычислении энергии основного состояния.

§ 3 ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ В ПРОБЛЕМЕ МНОГИХ ТЕЛ

Рассмотрим теперь, следуя работе [3], формализм в проблеме многих тел, в котором явно вводятся только индивидуальные координаты частиц. Этот подход связан с методом, развитым Хаббардом [10]. Диэлектрический формализм основан на рассмотрении динамической диэлектрической проницаемости $\epsilon(k, \Omega)$ и получении при произвольном волновом векторе k и частоте Ω выражения для нее, с помощью которого можно довольно просто определить энергию основного состояния системы.

Чтобы найти $\epsilon(k, \Omega)$, введем в свободный электронный газ слабый пробный распределенный заряд с плотностью

$$\rho = e(r_k e^{-l(\Omega + kr)} + \text{Компл. сопр.}). \quad (8)$$

В отсутствие пробного заряда среднее значение компоненты плотности $\rho_{k'}$, $\langle \rho_{k'} \rangle$, равно нулю. При наличии пробного заряда $\langle \rho_{k'} \rangle$ будет также равно нулю, кроме случая $k' = \pm k$. Запишем макроскопические уравнения Пуассона

$$\begin{aligned} \operatorname{div} D &= 4\pi \rho_{\text{act}}, \\ \operatorname{div} E &= 4\pi (\rho_{\text{act}} + \rho_{\text{int}}), \end{aligned} \quad (9)$$

где E — вектор электростатического поля, а D — вектор электростатической индукции; плотность ρ_{act} точно соответствует пробному заряду, а ρ_{int} — плотность поляризационных зарядов внутри электронного

газа, обусловленных пробным зарядом. Применяя к (9) преобразование Фурье, приходим к выражениям вида

$$\begin{aligned} \varepsilon(k, \Omega) k E_k &= 4\pi e r_k, \\ k E_k &= 4\pi e (r_k + \langle \rho_k \rangle). \end{aligned} \quad (10)$$

Для очень больших k эти макроскопические соотношения не имеют смысла; мы будем рассматривать выражение (10) как *определение* диэлектрической проницаемости $\varepsilon(k, \Omega)$:

$$\frac{1}{\varepsilon(k, \Omega)} = 1 + \frac{\langle \rho_k \rangle}{r_k}. \quad (11)$$

Таким образом, чтобы знать диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(k, \Omega)$, достаточно знать $\langle \rho_k \rangle$

Пробный заряд действует на систему как возмущение H_1 . Чтобы избежать какой-либо передачи энергии, мы будем включать пробный заряд адиабатически, определяя H_1 как

$$H_1 = \frac{4\pi e^2}{k^2} (\rho_{-k} r_k e^{-i\Omega t} + \text{Компл. сопр.}) e^{\eta t}, \quad (12)$$

где η — мало и после проведения вычислений полагается равным нулю. Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(k, \Omega)$ подсчитывается в предположении, что реакция системы линейна: пробный заряд, таким образом, считается как угодно малым (для сингулярных потенциалов взаимодействия, таких, как отталкивание между твердыми сферами, реакция системы по отношению к интенсивности пробного воздействия может быть и нелинейна, поэтому последующие вычисления для этих случаев непригодны). Определим реакцию системы на воздействие пробного заряда, используя для исключения гамильтониана взаимодействия H_1 временное каноническое преобразование. Пусть $\Psi_0(0)$ и $\Psi_0(r_k)$ будут точными волновыми функциями основного состояния в отсутствие и при наличии пробного заряда r_k . Каноническое преобразование определяется с помощью производящей функции $S(t)$

$$\Psi_0(r_k) = e^{iS(t)} \Psi_0(0). \quad (13)$$

Поскольку нас интересует только линейная реакция системы, мы можем исключить H_1 , выбирая функцию S такой, чтобы

$$\frac{i}{\hbar} [H_0, S] - \frac{dS}{dt} = -H_1. \quad (14)$$

Наиболее общая форма решения для S тогда будет иметь вид

$$S = [A_k r_k e^{-i\Omega t} + B_k r_{-k} e^{i\Omega t}] e^{\eta t}. \quad (15)$$

Подставляя это выражение в уравнение (14), находим

$$(A_k)_{n0} = -i \frac{4\pi e^2}{k^2} \frac{1}{\omega_{n0} + \Omega + i\eta} (\rho_{-k})_{n0}, \quad (16)$$

где индекс $n0$ означает, что матричный элемент оператора, стоящего в скобках, вычисляется с помощью точных функций состояния n и 0 для системы с включенным взаимодействием H_1 . Состояние 0 является основным состоянием гамильтониана H_0 , а частота ω_{n0} равна $(E_n - E_0)/\hbar$. Итак, мы можем определить $\Psi_0(r_k)$ в первом порядке разложения по r_k , и тогда

$$\langle \rho_k \rangle = \langle \Psi_0^*(r_k) | \rho_k | \Psi_0(r_k) \rangle = \langle \Psi_0^*(0) | e^{-iS} \rho_k e^{iS} | \Psi_0(0) \rangle.$$

Разлагая $\langle \rho_k \rangle$ в ряд по степеням r_k и сохраняя только линейные члены, получаем

$$\langle \rho_k \rangle = \frac{i}{\hbar} [\rho_k, S]_{00}$$

и

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon(k, \Omega)} - 1 &= \frac{\langle \rho_k \rangle}{r_k} = \\ &= -\frac{4\pi e^2}{k^2} \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \left(\frac{1}{\omega_{n0} + \Omega + i\eta} + \frac{1}{\omega_{n0} - \Omega - i\eta} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Выражение (17) по виду очень похоже на формулу Крамерса — Гейзенберга, однако в нашем случае матричные элементы и разности энергий относятся к истинным собственным состояниям гамильтониана H_0 ,

а не к значениям, вычисленным в приближении свободных частиц

Пусть η стремится к нулю. Рассмотрим мнимую часть $1/\epsilon$

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(k, \Omega)} \right) = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar k^2} \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 [\delta(\omega_{n0} + \Omega) - \delta(\omega_{n0} - \Omega)].$$

Для основного состояния величина ω_{n0} положительна для всех n и выражение для $\text{Im}(1/\epsilon)$ упрощается

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(k, \Omega)} \right) = - \frac{4\pi^2 e^2}{k^2 \hbar} \sum_n |(\rho_k)_{n0}|^2 \delta(\omega_{n0} - \Omega). \quad (18)$$

Если мы проинтегрируем обе части (18) по всем частотам Ω , то получим выражение

$$- \int_0^\infty \text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(k, \Omega)} \right) d\Omega = \frac{4\pi^2 e^2}{k^2 \hbar} \langle \Psi_0(0) | \rho_k^* \rho_k | \Psi_0(0) \rangle,$$

с помощью которого можно определить среднюю энергию кулоновского взаимодействия

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \langle \Psi_0^*(0) | H_{\text{Coul}} | \Psi_0(0) \rangle = \\ &= - \sum_k \left[\frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty \text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(k, \Omega)} \right) d\Omega - \frac{2\pi n e^2}{k^2} \right]. \quad (19) \end{aligned}$$

Обозначим через $E_{\text{int}}(e'^2)$ среднюю энергию взаимодействия для константы связи e'^2

$$E_{\text{int}}(e'^2) = \langle \Psi_0^*(0) | \sum_k \frac{2\pi e'^2}{k^2} (\rho_k^* \rho_k - n) | \Psi_0(0) \rangle.$$

Энергия основного состояния исходной системы определяется формулой

$$E_0(e^2) = E_{\text{int}}(e^2) + \langle \Psi_0^*(0) | T | \Psi_0(0) \rangle,$$

где T — оператор кинетической энергии,

Дифференцируя это выражение, получаем

$$\frac{\partial E_0}{\partial e'^2} = \frac{E_{\text{int}}(e'^2)}{e'^2},$$

так как

$$\frac{\partial}{\partial e'^2} \int |\Psi_0(0)|^2 d\tau = 0.$$

Таким образом, следуя идее Паули, мы находим

$$E_0(e^2) = E_0(0) + \int_0^{e^2} \frac{d(e'^2)}{e'^2} E_{\text{int}}(e'^2). \quad (20)$$

Из выражений (19) и (20) следует, что, зная диэлектрическую проницаемость $\epsilon(k, \Omega)$ для всех значений k, Ω и величины e^2 , можно определить энергию основного состояния системы. Так как экспериментально измерить проницаемость $\epsilon(k, \Omega)$ как функцию e^2 нельзя, то прямое определение E_0 из эксперимента возможно только в том случае, если мы предположим какую-либо зависимость ϵ от квадрата e .

Чтобы подсчитать E_0 , необходимо вычислить $\epsilon(k, \Omega)$. Это можно сделать довольно просто с помощью канонических преобразований, аналогичных (13) и (14). Простейшее приближение заключается в полном пренебрежении кулоновским взаимодействием при вычислении $(\rho_k)_{n0}$ и ω_{n0} (метод возмущений). Вид этих канонических преобразований сохраняется; это те же выражения (15) и (16), в которых ω_{n0} и $(\rho_{-k})_{n0}$ заменены на $\omega_{\mu 0}$ и $(\rho_{-k})_{\mu 0}$, причем состояния μ и 0 относятся теперь к возбужденному и основному состояниям системы невзаимодействующих частиц. Таким образом, получаем

$$\frac{1}{\epsilon(k, \Omega)} = 1 - 4\pi\alpha(k, \Omega), \quad (21)$$

где $\alpha(k, \Omega)$ — комплексная поляризуемость, определяемая формулой Крамерса — Гейзенберга

$$4\pi\alpha(k, \Omega) = \frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} \sum_{\mu} |(\rho_k)_{\mu 0}|^2 \left(\frac{1}{\omega_{\mu 0} + \Omega + i\eta} + \frac{1}{\omega_{\mu 0} - \Omega - i\eta} \right). \quad (22)$$

Подстановка выражения (21) в (19) и (20) приводит к приближению Хартри — Фока для энергии основного состояния.

Перейдем теперь к вычислению $\epsilon(k, \Omega)$ в приближении хаотических фаз. В этом приближении мы пренебрегаем связью между различными фурье-компонентами взаимодействия. Поэтому, если мы введем в систему пробный заряд, характеризуемый волновым вектором k , то мы можем при рассмотрении реакции системы на это возмущение ограничиться исследованием только k -й фурье-компоненты потенциала электронного взаимодействия. Функция основного состояния $\Psi_0(r_k)$ будет комбинацией плоских волн основного состояния $\Psi_0(0)$ и возбужденных состояний, содержащих четное число электронно-дырочных пар с общим импульсом $+k$ и $-k$.

Записывая оператор канонического преобразования S в форме (15), подсчитаем коммутатор его с оператором кулоновского взаимодействия:

$$[H_{\text{Coul}}, S],$$

причем сохраним только ту часть S , которая приводит к диагональным вкладам относительно плоских волн. Тогда

$$(A_k)_{n0} = -i \frac{4\pi e^2}{k^2} \frac{1}{\omega_{n0} + \Omega + i\eta} \frac{(p-k)_{n0}}{1 + 4\pi\alpha(k, \Omega)},$$

где $\alpha(k, \Omega)$ — поляризуемость, определяемая формулой (22), а комплексная диэлектрическая проницаемость выражается в виде

$$\epsilon(k, \Omega) = 1 + 4\pi\alpha(k, \Omega). \quad (23)$$

Для малых α результат (22) при пренебрежении кулоновским взаимодействием дает первый член разложения (23). Однако для малых значений k величина α оказывается большой и метод возмущений, используемый для вывода (21), становится неприменимым.

Зависимость $\epsilon(k, \Omega)$ от e^2 в этом случае хорошо известна, и мы можем легко получить среднюю энергию взаимодействия и энергию основного состояния с помощью (19) и (20). Энергия основного состояния,

вычисленная таким образом, совпадает с энергией, полученной в работе Савады и др. [5, 6].

Теперь рассмотрим, как в предлагаемом формализме появляются плазмоны. Рассмотрим вновь уравнение

$$\begin{aligned} kE_k \epsilon(k, \Omega) &= 4\pi e r_k, \\ kE_k &= 4\pi e [r_k + \langle \rho_k \rangle]. \end{aligned} \quad (10)$$

При отсутствии пробного заряда обычно имеем

$$\epsilon(k, \Omega) \neq 0 \quad \text{и} \quad \langle \rho_k \rangle = 0.$$

Однако, если даже $\epsilon(k, \Omega) = 0$, мы можем иметь

$$\langle \rho_k \rangle \neq 0.$$

Эта ситуация соответствует случаю плазмонов, которые представляют собой ненулевые колебания плотности в отсутствие внешнего поля.

Положим

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2.$$

Тогда спектр плазмонов определяется соотношением

$$\epsilon_1(k, \Omega) = 0.$$

Корни этого уравнения определяют дисперсионное соотношение для плазмонов (6а). Более того, если

$$\epsilon_2(k, \Omega) = 0,$$

график дисперсионной зависимости представляет собой линию, а $\text{Im}(1/\epsilon)$ есть просто δ -функция. Если

$$\epsilon_2(k, \Omega) \neq 0,$$

но мало, то имеет место затухание плазмонов, и плазмоны больше не будут полностью независимыми элементарными возбуждениями.

Часто удобно ввести так называемые силы осциллятора для электронного газа, f_{on} , определяемые соотношением

$$f_{on} = \frac{2m}{\hbar k^2} \omega_{n0} |(\rho_k)_{n0}|^2.$$

С помощью f_{0n} величины ϵ_1 и ϵ_2 можно выразить следующим образом:

$$\begin{aligned}\epsilon_1(k, \Omega) &= 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_n \frac{f_{n0}}{\omega_{n0}^2 - \Omega^2}, \\ \epsilon_2(k, \Omega) &= \frac{4\pi}{m} e^2 \sum_n f_{n0} \delta(\omega_{n0} - \Omega).\end{aligned}\quad (24)$$

Для случая продольных колебаний можно вывести следующее нормировочное соотношение:

$$\sum_n f_{n0} = n \quad (25)$$

(это правило легко получается с помощью вычисления коммутатора $[\rho_{-k}, [\rho_k, H_0]]$ двумя способами: в первом случае вводится точная форма H_0 , во втором случае этот коммутатор выражается через матричные элементы и собственные значения энергии). Если $\Omega \gg \omega_{n0}$, то из (24) и (25) получаем уравнение

$$\epsilon_1 \approx 1 - \frac{4\pi n e^2}{m\Omega^2},$$

корень которого представляет частоту плазмона ω_p .

Если мы рассмотрим возбуждения для свободного электронного газа, то получим упомянутые выше дисперсионные соотношения (6а) и (6б) для плазмонов. Из соотношений (24) видим, что пока плазмонный корень $\Omega_0(k)$, определяемый уравнением

$$\epsilon_1(k, \Omega_0) = 0,$$

лежит выше максимальной частоты возбуждения частиц при данной длине волны

$$\frac{k p_0}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m},$$

мы имеем

$$\epsilon_2(k, \Omega_0) = 0,$$

так что никакого затухания плазмонов нет. Таким образом, в приближении хаотических фаз плазмоны

представляют полностью независимые элементарные возбуждения для волновых векторов, удовлетворяющих соотношению

$$k \leq k_c \approx \frac{\omega_p}{v_0}.$$

Вклад плазмона в энергию взаимодействия будет

$$E_{\text{int}}(k) = \frac{\hbar\omega(k)}{4} - \frac{2\pi ne^2}{k^2}.$$

Интегрирование этого выражения по e^2 в случае малых импульсов приводит к известному результату для корреляционной энергии (5).

Рассмотрим теперь вклад в энергию основного состояния от отдельных электронов и роль экранирования. Вклад в энергию взаимодействия в приближении Хартри — Фока имеет вид

$$-E_{\text{int}}(k) = -\frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty d\Omega \{\varepsilon_2(k, \Omega)\} + \frac{2\pi ne^2}{k^2}. \quad (26a)$$

В рамках приближения хаотических фаз вместо (26a) будем иметь

$$-E_{\text{int}}^{RPA}(k) = -\frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty d\Omega \frac{\varepsilon_2(k, \Omega)}{(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)} + \frac{2\pi ne^2}{k^2}. \quad (26b)$$

Таким образом, вклад от отдельных электронов ослабляется для каждого волнового вектора k и частоты Ω в $(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)$ раз. Это — тот множитель, который представляет экранирование поля каждого электрона его соседями в приближении хаотических фаз. Особенно существенно это экранирование для малых k , когда

$$\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2 \approx \frac{3\omega_p^2}{k^2 v_0^2}.$$

§ 4 СПРАВЕДЛИВОСТЬ ПРИБЛИЖЕНИЯ ХАОТИЧЕСКИХ ФАЗ; КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ЭНЕРГИЯ ДЛЯ РЕАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛАХ

Как показали Гелл-Манн и Бракнер, энергию основного состояния системы в расчете на один электрон в случае высокой плотности можно записать в виде разложения

$$E = \frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} + A \ln r_s + B + Cr_s + Dr_s \ln r_s + \dots, \quad (27)$$

причем энергия выражена здесь в ридбергах, r_s — межэлектронное расстояние, измеряемое в единицах боровского радиуса и определяемое соотношением

$$\frac{4\pi r_s^3}{3} a_0^3 = \frac{1}{n}.$$

Первый член разложения (27) представляет собой среднюю энергию Ферми для электронов, второй — среднюю обменную энергию на электрон, так что первые два члена соответствуют энергии E в приближении Хартри — Фока. Оставшиеся члены, таким образом, представляют собой корреляционную энергию на электрон. В приближении хаотических фаз для корреляционной энергии находим

$$A = 0,062,$$

$$B = -0,140.$$

Член, пропорциональный r_s , точно не определен. Таким образом, мы приходим к постановке двух тесно связанных между собой вопросов:

1) Насколько справедливо выражение вида (27) для корреляционной энергии при реальных значениях плотности электронов в металлах?

2) Какова справедливость приближения хаотических фаз?

Мы дадим здесь краткие ответы на эти вопросы, исходя из физических соображений.

Возникновение обменной энергии в выражении (27) объясняется тем, что сама волновая функция Ψ ,

удовлетворяющая принципу Паули, уже содержит корреляцию между электронами с параллельными спинами. Каждый электрон может рассматриваться как окруженный обменной областью размера λ_{exch} , внутри которой маловероятно найти другой электрон с таким же спином. Непосредственное вычисление показывает [11], что

$$\lambda_{\text{exch}} \approx (0,5k_0)^{-1} \approx r_s.$$

Аналогичным образом можно ввести понятие корреляционной области, характеризующей стремление электронов расталкиваться вследствие кулоновского взаимодействия. Размер корреляционной области λ_c по порядку величины совпадает с длиной экранирования, так как само экранирование появляется вследствие тенденции электронов к расталкиванию. В рамках приближения хаотических фаз длина экранирования

$$\lambda_c \approx \frac{v_0}{\omega_p} \approx \frac{k_0}{r_s^{1/2}} \sim r_s^{1/2}.$$

{это длина волны, для которой уменьшение (26б) по сравнению с (26а) приблизительно соответствует введению множителя $1/2$.} Относительная величина экранирования и корреляции, таким образом, определяется выражением

$$\left(\frac{\lambda_{\text{exch}}}{\lambda_c} \right) \sim r_s^{1/2}.$$

В случае высокой плотности $r_s \ll 1$ и $\lambda_{\text{exch}} \ll \lambda_c$. Физически это соответствует тому, что в этом предельном случае для удержания электронов на возможно большем расстоянии принцип Паули играет гораздо большую роль, чем кулоновское взаимодействие. Следовательно, в этом предельном случае обменная энергия велика по сравнению с корреляционной энергией. Более того, вышеописанное соотношение дает нам информацию о законности вычисления корреляционной энергии в приближении хаотических фаз.

В приближении хаотических фаз взаимодействие электронов с параллельными и антипараллельными

спинами рассматривается эквивалентным образом. Вследствие этого в разложениях теории возмущений для энергии полностью пренебрегают вкладами от обменных диаграмм, соответствующих электронам с параллельными спинами. Обменные диаграммы будут давать существенный вклад тогда, когда интересующий нас импульс передачи (т. е. такой, который соответствует большому вкладу в корреляционную энергию) сравним или больше величины $\lambda_{\text{exch}}^{-1}$.

Таким образом, для применимости приближения хаотических фаз требуется, чтобы

$$k_c \ll \lambda_{\text{exch}}^{-1} \quad \text{или} \quad \frac{\lambda_{\text{exch}}}{\lambda_c} \ll 1.$$

Как мы уже видели, это условие выполняется при высоких плотностях, так что выражение для корреляционной энергии в приближении хаотических фаз будет иметь смысл именно в этой области. Более того, вследствие малости отношения $\lambda_{\text{exch}}/\lambda_c$ можно ожидать, что разложение, в котором последовательно учитываются диаграммы, содержащие одну обменную часть, две обменные части и т. д., будет сходиться. Это именно такое разложение, которое приводит к ряду Гелл-Манна — Бракнера для энергии основного состояния. Исходя из этих соображений, Нозьер и Пайнс [3] сделали вывод о том, что радиус сходимости разложений (26) равен $r_s \approx 1$. Поэтому для значений $r_s \leq 1$ такое рассмотрение является оправданным. Для $r_s \geq 1$ обменные диаграммы играют все более значительную роль, и в этом случае нет оснований думать, что рассматриваемое разложение для энергии имеет смысл в области значений действительных плотностей электронов в металлах ($2 \leq r_s \leq 5,5$).

Тот факт, что приближение хаотических фаз нельзя использовать при подсчете корреляционной энергии в случае действительных плотностей электронов в металлах, все же не означает, что эта аппроксимация вообще непригодна в области данных значений плотности. Вышеприведенное рассмотрение показывает, что метод хаотических фаз можно с успехом применить для импульсов передачи порядка $k \leq 0,5 k_0$ (60-

лее детальное вычисление [3], основанное на рассмотрении простого ряда поправочных членов к приближению хаотических фаз, дает несколько менее жесткий предел $k \leq 0,5k_0 (r_s^{1/2})$. Трудность расчета в случае действительных плотностей электронов в металлах заключается в том, что значительные вклады в корреляционную энергию обусловлены взаимодействием с большими импульсами передачи, для которых расчет в пределах приближения хаотических фаз неприменим. При очень больших импульсах передачи ($k > 0,5 k_0$) ситуация упрощается. В этом случае вклады от обменных диаграмм вполнину компенсируют вклады от диаграмм, соответствующих прямому взаимодействию, так что вклады в корреляционную энергию обусловлены только взаимодействием электронов с антипараллельными спинами. Это соответствует тому, что вследствие принципа Паули электроны с параллельными спинами просто не приближаются достаточно близко друг к другу и, следовательно, не проявляют при этом короткодействующей части взаимодействия, соответствующей большим значениям импульса передачи.

Основная трудность заключается в том, что не существует еще точного метода вычисления вкладов в корреляционную энергию для промежуточных по отношению к этим крайним случаям значений импульсов. В работе [3] можно найти подробное обсуждение этих вопросов. В ней предлагается интерполяционный метод для промежуточной области между низкими и высокими значениями импульсов передачи, который тесно связан с методом, используемым Хаббардом, и который упрощенно может выглядеть так:
в области

$$k < k_c = 0,47r_s^{1/2}k_0$$

для подсчета корреляционной энергии используется приближение хаотических фаз;
в области

$$k > k_c$$

следует использовать второй порядок теории возмущений, в котором учитываются взаимодействия только между электронами с антипараллельными спинами.

Тогда для корреляционной энергии (в ридбергах) можно получить выражение

$$E_c = -0,115 + 0,031 \ln r_s, \quad (28)$$

которое оправдывается с точностью до 15%.

§ 5. ЭЛЕКТРОННО-ИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

В этом параграфе мы используем диэлектрический формализм для исследования системы электронов и ионов, взаимодействующих только по закону Кулона. Исходный гамильтониан системы записывается в виде

$$H = \sum_l \frac{p_l^2}{2m} + \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_k^* \rho_k - n) + \sum_l \frac{p_l^2}{2M} + \\ + \sum_k \frac{2\pi Z^2 e^2}{k^2} (R_k^* R_k - N) - \sum_k \frac{4\pi Z e^2}{k^2} \rho_k R_k^*, \quad (29)$$

где N — плотность, M — масса, Z — заряд и R_k — компонента колебаний плотности ионов. Сравнивая выражение (29) с (1), мы видим, что эти два гамильтониана полностью подобны и что члены взаимодействия в форме (29) можно получить из выражения (1), заменив ρ_k на $\rho_k - ZR_k$. Поэтому мы можем сразу же обобщить диэлектрический формализм (§ 4) на этот случай, уделяя особое внимание лишь определению диэлектрической проницаемости для связанной электронно-ионной системы:

$$\frac{1}{\epsilon(k, \Omega)} = \frac{\langle \rho_k - ZR_k \rangle}{r_k} + 1,$$

где, как и прежде, r_k — зависящий от частоты пробный заряд, который вводится, чтобы определить и подсчитать константу $\epsilon(k, \Omega)$, а среднее $\langle \rangle$ представляет собой среднюю величину в присутствии r_k .

Мы можем тогда непосредственно получить выражение для $\epsilon(k, \Omega)$ и энергии основного состояния в пределах приближения хаотических фаз. При проведении этой процедуры сначала перейдем к более ре-

альному описанию движения ионов¹⁾. В отсутствие электронно-ионного взаимодействия система положительных ионов, помещенная в однородный фон отрицательного заряда эквивалентной суммарной плотности, образует кристаллическую решетку. Нормальные возбуждения этой системы были изучены Коном и Кьелдаасом²⁾. Чисто ионную часть гамильтониана можно привести к форме

$$\frac{1}{2} \sum_{\mu k} [\Pi_{k\mu}^* \Pi_{k\mu} + \Omega_{k\mu}^2 Q_{k\mu}^* Q_{k\mu}].$$

Существует простое правило для суммы квадратов фононных частот, называемое правилом сумм

$$\sum_{\mu} \Omega_{k\mu}^2 = \Omega_p^2.$$

В пределе малых k продольные фононы имеют частоты

$$\Omega_p \sim k^2,$$

в то время как поперечные фононы обладают частотами, пропорциональными k . Мы можем выразить колебание плотности R_k через эти нормальные возбуждения:

$$R_k = \sum_l e^{-ikR_{0l}} + \sum_{\mu} ik\eta_{k\mu} \sqrt{\frac{N}{M}} Q_{k\mu}, \quad (30)$$

где $\eta_{k\mu}$ — вектор поляризации фонона $Q_{k\mu}$. Так как существует максимальное значение для волнового вектора фонона K_n (определяемое размером первой зоны обратной решетки и соответствующее тому факту, что в системе не может быть более $3N$ независимых фононных возбуждений), то для больших значений k величины $\eta_{k\mu}$ и $Q_{k\mu}$ в выражении (30) следует заменить соответственно на $\eta_{k+K, \mu}$ и $Q_{k+K, \mu}$, где вектор обратной решетки K определяется единственным

1) Выражение для $\epsilon(k, \Omega)$ в приближении хаотических фаз, в котором ионы рассматривались как свободно движущиеся по всей системе, было получено в работе [12]

2) W. Kohn, T. Kjeldaa, частное сообщение.

образом как такой вектор, который приводит k снова в первую зону Бриллюэна.

Поэтому гамильтониан (29) преобразуется к виду

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(r_i) + \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} (\rho_k^* \rho_k - n) + \sum_{k\nu} \frac{\Pi_{k\nu}^* \Pi_{k\nu}}{2} + \frac{Q_{k\nu}^2 Q_{k\nu}}{2} + \sum_{k\nu} V_{k\nu}^i Q_{k\nu} \rho_{-k}, \quad (31)$$

где

$$V_{k\nu}^i = ik\eta_{k\nu} \sqrt{\frac{NZ^2}{M}} \frac{4\pi e^2}{k^2}. \quad (32)$$

и, кроме того, мы должны в $\eta_{k\nu}$ и $Q_{k\nu}$ преобразовать соответствующим образом волновой вектор k в случае, когда $k > K_n$. В дальнейшем для простоты ограничимся случаем $k < K_n$ и будем рассматривать продольные волны. Мы будем, однако, учитывать периодический потенциал ионов $V(r_i)$ в качестве иллюстрации к тому, каким образом можно ввести в рассмотрение подобные члены. Дальнейшее обобщение на случай больших k и поперечных фононов производится непосредственно. Наша задача заключается в отыскании производящей функции S , которая в приближении хаотических фаз позволила бы решить следующее уравнение:

$$\frac{i}{\hbar} [H, S] - \frac{\partial S}{\partial t} = - \left(\frac{4\pi e^2}{k^2} \rho_{-k} + V_k^i Q_{-k} \right) r_k e^{-iS t + \eta t} + \text{Компл. сопр.},$$

где

$$V_k^i = ik \sqrt{\frac{NZ^2}{M}} \frac{4\pi e^2}{k^2}.$$

Соответствующая функция S имеет вид

$$(S)_{n0} = (g_{n0} (\rho_{-k})_{n0} + \alpha Q_{-k} + \beta \Pi_k) r_k e^{-iS t + \eta t} + \text{Компл. сопр.}$$

Матричные элементы

$$S_{n0}, g_{n0} \text{ и } (\rho_{-k})_{n0}$$

определяются по отношению к детерминантам, построенным с помощью волн Блоха — собственных функций гамильтониана

$$\sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(r_i).$$

Соответствующие энергии возбуждений равны

$$\hbar\omega_{n0} = E_n - E_0,$$

где E_n и E_0 также относятся к состояниям, определяемым волнами Блоха. Приближение хаотических фаз вводится в рассматриваемую задачу следующим образом. При подсчете коммутатора функции S с оператором, соответствующим кулоновскому взаимодействию, в гамильтониане H сохраняются лишь те члены, которые зависят от ρ_k , а именно:

$$\frac{i}{\hbar} \frac{2\pi e^2}{k^2} \{[\rho_k, S]_{00} \rho_{-k} + \rho_k [\rho_{-k}, S]_{00}\} = \frac{i}{\hbar} \frac{4\pi e^2}{k^2} [\rho_k, S]_{00} \rho_{-k}.$$

Аналогично при подсчете коммутатора S с оператором $\sum_k V_{k\rho-k} Q_k$ берется средняя величина коммутатора $[S, \rho_k]$. Используя эти замечания, уже нетрудно найти уравнения для α , β и g_{n0} . Как только это будет сделано, подсчитывается выражение

$$\frac{1}{\epsilon} - 1 = \frac{i}{\hbar} \left[\left(\rho_k - iZk \sqrt{\frac{N}{M}} Q_k \right), S \right]_{00}. \quad (33)$$

Подобным образом находится диэлектрическая проницаемость

$$\epsilon(k, \Omega) = \epsilon^B(k, \Omega) - \frac{\Omega_p^2}{\Omega^2 + \Omega_p^2 - \Omega_0^2}, \quad (34)$$

где ϵ^B — чисто электронная диэлектрическая проницаемость, подсчитанная в приближении хаотических фаз, и Ω_0 — частота продольных фононов, соответствующих ионам в однородном фоне отрицательного заряда. Величина ϵ^B отличается от величины, определенной в § 3, тем, что она выражается с помощью

матричных элементов и энергий возбуждения, соответствующих состояниям, построенным из волн Блоха.

Таким образом, имеем

$$\epsilon_1^B = 1 + 4\pi\alpha_1^B = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_{\nu} \frac{f_{0\nu}}{\omega_{\nu 0}^2 - \Omega^2}, \quad (35a)$$

$$\epsilon_2^B = \frac{2\pi^2 e^2}{m} \sum_{\nu} \frac{f_{0\nu}}{\omega_{\nu 0}} \delta(\Omega - \omega_{\nu 0}), \quad (35b)$$

где $f_{0\nu}$ и $\omega_{\nu 0}$ — силы осцилляторов и частоты возбуждений в приближении блоховских функций.

Как и раньше, нули функции $\epsilon_1(k, \Omega)$ определяют коллективные возбуждения системы. Если положить $\Omega_0 \approx \Omega_p$, то будем иметь

$$\epsilon_1 = 1 + 4\pi\alpha^B - \frac{\Omega_p^2}{\Omega_0^2} \quad (36)$$

и мы приходим к наличию двух типов коллективных возбуждений: низкочастотные возбуждения, соответствующие фононам, и высокочастотные возбуждения, соответствующие плазмонам, которые лишь незначительно видоизменяются фононами. Энергия низкочастотного возбуждения Ω_1 подчиняется дисперсионному соотношению

$$\Omega_1^2 = \frac{\Omega_p^2}{\epsilon^B(\Omega_1)} \approx \frac{\Omega_p^2}{\epsilon^B(0)}. \quad (37)$$

Здесь $\epsilon^B(0)$ — статическая электронная диэлектрическая проницаемость. Этот результат уже был получен ранее в работе [8]. Мы можем разложить $\epsilon^B(0)$ в ряд:

$$\epsilon^B(0) \approx 1 + \frac{k_s^2}{k^2},$$

где k_s — экранирующий волновой вектор модели Томаса — Ферми, определяемый как

$$k_s^2 = 4\pi N(0) e^2,$$

где $N(0)$ — плотность состояний, соответствующих волнам Блоха для электронов; она отличается от значе-

ния для свободных электронов множителем m^*/m (m^* — эффективная масса). Таким образом, фононы удовлетворяют дисперсионному соотношению

$$\Omega_1^2 \approx \frac{k^2}{k_s^2} \Omega_p^2, \quad (38)$$

которое в случае свободных электронов преобразуется к виду

$$\Omega_1^2 = \frac{k^2 v_0^2}{3\omega_p^2} \Omega_p^2 = \frac{k^2 v_0^2}{3} \frac{Zm}{M} = s^2 k^2, \quad (39)$$

где s — скорость звука. Плазменные частоты определяются выражением

$$\Omega_2^2 \approx \Omega_e^2 + \Omega_p^2, \quad (40)$$

где Ω_e — частота чисто электронной плазмы, полученная как решение уравнения

$$1 = \frac{4\pi e^2}{m} \sum_{\nu} \frac{f_{0\nu}}{\Omega_e^2 - \omega_{\nu 0}^2}. \quad (41)$$

Обсуждение вопроса об изменении частоты Ω_e , вызываемого периодическим потенциалом, можно найти в серии статей Нозьера и Пайнса [13].

Энергию основного состояния системы взаимодействующих электронов и ионов можно вычислить с помощью (34) и (19). Нетрудно показать, что в полученном выражении будут определенные вклады от нулевой энергии фононов и плазмонов и, как и следовало ожидать, изменения в энергии будут порядка

$$\frac{s^2}{v_0^2} \sim \frac{mZ}{M}.$$

Представляет интерес сравнить полученные нами результаты с результатами работы [8], в которой электроны и ионы рассматривались как две отдельные, но взаимодействующие системы. Особенный интерес представляет суммарное эффективное взаимодействие между электронами у поверхности Ферми, которое приводит к сверхпроводимости в теории Бардина, Ку-

пера и Шриффера. Согласно Бардину и Пайнсу, эффективное взаимодействие между электронами состоит из двух частей: экранированного кулоновского взаимодействия и взаимодействия, индуцируемого фононами, именно, происходящего в результате обмена виртуальными фононами. Вторая часть взаимодействия была точно подсчитана и соответствует гамильтониану взаимодействия

$$H_{\text{ph}} = \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} \rho_{-k}^\alpha \rho_k^\alpha, \quad (42)$$

причем ρ_k^α определяется матричными элементами, вычисленными с помощью блоховских функций:

$$(\rho_k^\alpha)_{\mu 0} = - \frac{\Omega_1^2}{\Omega_1^2 - \omega_{\mu 0}^2} \frac{(\rho_k)_{\mu 0}}{\epsilon_B(k, \Omega_1)}, \quad (43)$$

где, как и прежде, Ω_1 — фононная частота. Соответствующий член для экранированного кулоновского взаимодействия можно лучше всего ввести с помощью техники, предложенной в работе [13], описывающей взаимодействие между небольшой группой электронов у поверхности Ферми. Как указано в работе [3], эта техника применима, когда $\epsilon_2 \ll \epsilon_1$, что имеет место при низких частотах, которые и представляют сейчас для нас интерес. Мы получим, что чисто кулоновское взаимодействие между электронами приводит к эффективному гамильтониану взаимодействия

$$H_{\text{elec}}^{\text{eff}} = \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} \rho_{-k}^\beta \rho_k^\beta, \quad (44)$$

где

$$(\rho_k^\beta)_{\mu 0} = \frac{(\rho_k)_{\mu 0}}{\epsilon_B(k, \omega_{\mu 0})}. \quad (45)$$

Таким образом, полный гамильтониан взаимодействия для низких частот возбуждения представляет сумму выражений (42) и (44) и при пренебрежении

зависимостью ϵ_B от частоты имеет вид

$$H_{\text{tot}}^{\text{eff}} = \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} \rho_{-k}^{\text{eff}} \rho_k^{\text{eff}}, \quad (46)$$

где

$$(\rho_k^{\text{eff}})_{\mu 0} = \frac{\omega_{\mu 0}^2}{\omega_{\mu 0}^2 - \Omega_1^2} \frac{(\rho_k)_{\mu 0}}{\epsilon_B(k, 0)}. \quad (47)$$

Комбинированное выражение такого типа было впервые получено Нозьером.

Чтобы сравнить это приближение с приближением, рассмотренным в настоящем параграфе, заметим, что в приближении хаотических фаз эффективное взаимодействие между небольшой группой электронов у поверхности Ферми можно получить из гамильтониана взаимодействия

$$H = \sum_k \frac{2\pi e^2}{k^2} \rho_{-k}^{\gamma} \rho_k^{\gamma}, \quad (48)$$

где

$$(\rho_k^{\gamma})_{\mu 0} = \frac{(\rho_k)_{\mu 0}}{\epsilon_1(k, \omega_{\mu 0})}, \quad (49)$$

так как мы можем пренебречь ϵ_2 по сравнению с ϵ_1 . Выражение для $\epsilon_1(k, \omega)$ определяется соотношением (36), которое теперь перепишем с помощью (37) в форме

$$\epsilon_1 \approx \epsilon_B(0) \left(1 - \frac{\Omega_p^2}{\epsilon_B(0) \Omega^2} \right) = \epsilon_B(0) \left[1 - \frac{\Omega_1^2}{\Omega^2} \right]. \quad (50)$$

Выбирая ϵ_1 таким образом, мы убеждаемся, что выражения (46) и (48) представляют собой идентичные эффективные гамильтонианы.

Интересно отметить, что, как подчеркнул Нозьер¹⁾, в выражении (46) эффективное взаимодействие между электронами исчезает, когда частота возбужде-

¹⁾ P. Nozières, частное сообщение. См. также [13].

ния стремится к нулю. Если перейти к конечным частотам, это взаимодействие соответствует притяжению, пока частота возбуждения не станет больше частоты звуковой волны Ω_1 . Однако этот вывод оказывается неправильным, если учесть дисперсию Ω_0 . Более того, совершенно не ясно, остается ли это утверждение в силе для коротковолновой части взаимодействия ($k > K_n$). В приближении хаотических фаз можно прийти к взаимодействию, соответствующему притяжению, которое не зависит от частоты при низких частотах возбуждения. Следовательно, наша задача сводится к рассмотрению вопроса о справедливости приближения хаотических фаз. Мне хотелось бы подчеркнуть, что здесь мы имеем дело с гораздо менее исследованным вопросом, чем в случае свободного электронного газа. Такое различие обусловлено эффектами периодичности, так как приближение хаотических фаз эквивалентно пренебрежению эффектами, связанными с неоднородностью равновесного распределения электронов в твердом теле.

ЛИТЕРАТУРА

1. Pines D., Bohm D., Phys. Rev., **85**, 332 (1952).
2. Nozières P., Pines D., Nouvo Cimento, **IX**, 470 (1958).
3. Nozières P., Pines D., Phys. Rev., **111**, 442 (1958).
4. Gell-Mann M., Brueckner K., Phys. Rev., **106**, 364 (1957).
5. Sawada K., Phys. Rev., **106**, 372 (1957).
6. Sawada K., Brueckner K., Fukuda N., Brout R., Phys. Rev., **108**, 507 (1957).
7. Bohm D., Pines D., Phys. Rev., **92**, 609 (1953).
8. Bardeen J., Pines D., Phys. Rev., **99**, 1140 (1955).
9. Bardeen J., Cooper L., Schrieffer J., Phys. Rev., **108**, 1175 (1957). (Имеется перевод в сб. «Теория сверхпроводимости», ИЛ, 1960.)
10. Hubbard J., Proc. Roy. Soc., **A240**, 539 (1957); **A243**, 336 (1958). (Имеется перевод в сб. «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959.)

-
11. Seitz F., *The Modern Theory of Solids*, Mc Graw Hill, Book Co, New York, 1940 (Имеется перевод: Зейтц Ф., *Современная теория твердого тела*, М.—Л., 1949.)
 12. Jung N., *Diplôme d'Etudes Supérieures*, Université de Paris, 1958.
 13. Nozières P., Pines D., *Phys. Rev.*, **109**, 741, 762, 1062 (1958).
 14. Brueckner K. A., в книге «*The Many—Body Problem*», New York, 1959). (Готовится русский перевод).
 15. Bohm D. в книге «*The Many — Body Problem*», New York, 1959. (Готовится русский перевод).

О Г Л А В Л Е Н И Е

Предисловие	5
Предисловие автора	7
Глава 1. Обзор основных физических представлений	9
§ 1. Введение	9
§ 2. Элементарные возбуждения в системах взаимодействующих частиц	13
§ 3. Коллективные возбуждения	18
§ 4. Физические представления	24
§ 5. Модельные задачи и физические системы	26
Электронный газ высокой плотности	26
Твердые тела с низкой плотностью электронов	29
Разреженный ферми-газ с произвольным короткодействующим взаимодействием типа отталкивания	30
Модель сверхпроводимости Бардина — Купера — Шриффера	32
Разреженный бозе-газ со взаимодействием типа отталкивания	36
Ядерные системы	37
§ 6. Ряды теории возмущений и соображения стабильности	38
Глава 2. Математический аппарат	41
§ 1. История развития	41
§ 2. Возбуждения квазичастиц	46
Определение одночастичной функции Грина	46
Несколько простых примеров	47
Функция распределения	49
Спектральное представление	50
Определение квазичастицы	52
§ 3. Возбуждения колебаний плотности и коллективные возбуждения системы	56

Запаздывающая функция реакции системы . . .	56
Свойства и физический смысл $S(k\omega)$	61
Коллективные возбуждения	63
§ 4. Двухчастичные функции Грина	66
§ 5. Теоремы об энергии основного состояния	67
§ 6. Метод уравнений движения	69
§ 7. Временная теория возмущений	74
Применение диаграмм Фейнмана	74
Несколько простых примеров	78
Массовый оператор и уравнение Дайсона	79
Поляризационные диаграммы и $\epsilon_p(k\omega)$	81
Глава 3. Конкретные задачи	83
§ 1. Электронный газ	83
§ 2. Системы фермионов с короткодействующими си- лами отталкивания	98
§ 3. Системы бозонов в случае сил отталкивания	104
§ 4. Электрон-фононные взаимодействия	123
§ 5. Теория сверхпроводимости	134
Литература	152
Дополнительная литература	155

Дополнение

Электроны, плазмоны и фононы	159
§ 1. Введение	159
§ 2. Свободный электронный газ	160
§ 3. Диэлектрический формализм в проблеме многих тел	167
§ 4. Справедливость приближения хаотических фаз; корреляционная энергия для реальных значений плотности электронов в металлах	176
§ 5. Электронно-ионное взаимодействие	180
Литература	188

Д. П А Й Н С

**Проблема
многих тел**

Редактор Е. И. МАЙКОВА

Художник Л. Г. Ларский

Технический редактор В. П. Сизова

Сдано в производство 25/III 1963 г.

Подписано к печати 8/Х 1963 г.

Бумага $84 \times 108^{1/32} = 3,0$ бум. л.

9,8 печ. л.

Уч.-изд. л. 8,3. Изд. № 2/1961.

Цена 58 коп. Зак. 1271.

ИЗДАТЕЛЬСТВО
ИНОСТРАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ
Москва, 1-й Рижский пер., 2

Типография № 2 им. Евг. Соколовой
УЦВ и ПП Ленсовнархоза
Ленинград, Измайловский пр. 29

