ФУНКЦИИ ГРИНА

ЗАДАЧИ И РЕШЕНИЯ

Л. С. Левитов и А. В. Шитов

Л. С. Левитов, А. В. Шитов, Функции Грина. Задачи и решения. 2-е изд., дополн.–М.:Физматлит. 2002 — 352 с.

Тема учебника — квантовая физика систем, состоящих из большого числа частиц. Книга в форме сборника задач позволяет рассмотреть основные теоретические методы этого раздела физики и одновременно охватить большой круг конкретных физических явлений.

Задачи первой части книги подобраны так, чтобы на примере известного читателю материала по нерелятивистской квантовой механике проиллюстрировать метод функций Грина. Задачи сопровождаются подробными решениями и комментариями, поясняющими мотивировку и связь с разнообразными вопросами современной теории конденсированного состояния. В начале каждой главы кратко излагается необходимый материал по фейнмановской диаграммной технике. Вторая часть книги построена по той же схеме, что и первая. В нее включены задачи по нескольким актуальным разделам физики конденсированного состояния. Это — теория ферми-жидкости, неупорядоченные системы, сверхпроводимость и одномерные сильно коррелированные системы. Помимо этого, во второй части рассматриваются вопросы, связанные с измерением функций отклика и гриновских функций.

Книга предназначена для студентов старших курсов, специализирующихся в области теоретической физики, физики твердого тела и низких температур, а также для аспирантов-физиков и научных работников.

Оглавление

Предисловие

Метод функций Грина, предложенный Р. Фейнманом в квантовой электродинамике, уже давно стал универсальным языком всей теоретической физики. Знание диаграммной техники и умение использовать функции Грина является неотъемлемой частью образования физика-теоретика, независимо от конкретной области его интересов. При этом студенту, желающему изучить эти методы, обычно приходится вначале знакомиться с ними в рамках курса квантовой теории поля, поскольку по историческим причинам в учебной литературе основное внимание уделялось именно этой области.

В теорию конденсированного состояния, изучающую квантовые свойства твердых тел и других многочастичных систем, диаграммная техника прочно вошла еще в середине 50-х годов. Как нетрудно проследить, практически все основные достижения в этой области теоретической физики были так или иначе связаны с развитием диаграммной техники. Применение функций Грина в теории твердого тела освещено в обширной литературе, центральное место в которой занимает хорошо известная монография А. А. Абрикосова, Л. П. Горькова и И. Е. Дзялошинского, «Методы квантовой теории поля в статистической физике» [1]. Эта замечательная книга, к сожалению, не может считаться учебником в полном смысле слова, поскольку в ней отсутствуют задачи, а кроме того предполагается, что читатель отчасти знаком с методами квантовой теории поля.

В настоящее время, однако, студенты часто изучают методы функций Грина, используя книгу [1] или другие аналогичные пособия, не после квантовой теории поля, а одновременно или даже несколько раньше. Это связано с тем, что современная физика твердого тела достаточно богата идеями и содержательными результатами, а теория конденсированного состояния имеет много связей с квантовой теорией поля. Поэтому нам казалось весьма полезным изложить необходимый для освоения диаграммной техники материал таким образом, чтобы он был доступен студенту, знакомому лишь с основами квантовой механики.

Предлагаемая читателю книга возникла как попытка устранить указанный пробел в учебной литературе. Основу книги составили материалы занятий по теории твердого тела со студентами МФТИ в 1992–94 гг, в которых в качестве учебника использовалась книга [1]. По собственному опыту авторам известно, что читателю «вечнозеленой книги о функциях Грина» приходится, как всегда при изучении трудного материала, самому придумывать себе примеры и простые задачи. Исходной идеей было — систематизировать этот опыт и снабдить читателя [1] достаточно интересными, но не слишком трудными задачами.

В процессе написания книги мы постарались сделать ее по возможности независимой от других учебных пособий. Для этого в начале всех главы помещены вступительные разделы, в которых напоминается нобходимый теоретический материал, сравниваются различные подходы, кратко суммируются основные теоретические положения, и т.п. После этого идут разделы с задачами[1] и их подробными решениями.

Иногда, если в этом имеется необходимость, приведено несколько различных решений одной и той же задачи. Помимо этого, воспользовавшись преимуществами избранной формы задачника, более свободной, чем учебник или монография, мы включили в книгу разнообразные отступления и «вставные новеллы», объясняющие мотивировку тех или иных задач, или поясняющие связь с вопросами теории, представляющими интерес в настоящее время и недостаточно освещенными в учебниках. Эти отступления помещены в конце некоторых глав.

Книга состоит из двух частей, что соответствует разделению материала по двум различным уровням трудности. Часть I имеет вводный характер. Ее основная идея — на примере фактов, известных читателю из курса квантовой механики, проиллюстрировать основные положения метода функций Грина и, так сказать, пересказать квантовую механику одной частицы на графическом языке диаграммной техники. Кроме того, в первой части вводится аппарат функций Грина, отдельно при нулевой и конечной температуре. При этом от читателя не требуется предварительного знакомства с физикой твердого тела, поскольку практически все используемые примеры имеют общефизический характер, а необходимый фактический материал изложен по ходу дела.

В часть II входят основные разделы современной теории твердого тела, такие как теория ферми-жидкости, теория неупорядоченных систем, включая возникшую за последние 20 лет теорию слабой локализации и квантовых эффектов в проводимости, а также теория сверхпроводимости, и теория одномерных сильно-коррелированных систем. Кроме того, в часть II включена глава «Измерение функций Грина», цель которой — установить связь между развиваемой теорией, опирающейся на функции Грина, и экспериментальными методами физики твердого тела. Кроме того, в этой главе сообщаются некоторые сведения из физики твердого тела, не всегда знакомые студентам-теоретикам.

Следует сказать, что отбор материала, легшего в основу части II, в сильной степени определяется вкусами и научными интересами авторов. При составлении задач мы стремились рассмотреть вопросы теории, представляющие интерес в настоящее время. При этом, однако, мы постарались избежать превращения книги в обзор современного состояния науки. Затронутые вопросы были отобраны в основном с точки зрения их общефизического интереса, а также исходя из того, насколько хорошо они иллюстрируют общий метод функций Грина.

В заключении нам хотелось бы поблагодарить наших коллег, без участия которых эта книга не появилась бы: Д. А. Иванова, М. А. Скворцова, Д. Е. Фельдмана и В. П. Рубана, любезно предоставивших свои решения задач, которые впоследствии были переработаны и включены в книгу. Мы признательны также М. Ю. Рейзеру за ценные советы и указание на некоторые дефекты в ротапринтном издании части I (МФТИ, 1997). Разумеется вся ответственность за (неизбежные) ошибки, имеющиеся в настоящей книге, лежит на авторах. Мы будем крайне благодарны всем, кто пожелает указать на ошибки, опечатки, или просто обсудить какой-либо свя-

[1]Трудные задачи помечены знаком *. При первом чтении их можно пропустить.

занный с книгой вопрос. Связаться с авторами проще всего по электронной почте: levitov@mit.edu, shytov@itp.ac.ru (см. также http://www.mit.edu/ levitov/book).

Часть I

Теория возмущений

Глава 1.

Квазичастицы

1.1. Вторичное квантование. Канонические преобразования

Системы, состоящие из большого числа тождественных частиц, удобно изучать, пользуясь *методом вторичного квантования*. Напомним основную идею этого метода, не уточняя пока вид частиц. (В задачах физики твердого тела это могут быть, скажем, электроны, фононы, фотоны, экситоны и т. д.)

Рассмотрим вначале систему бозе-частиц, каждая из которых может находиться в одном из состояний $\psi_i(x)$, $i = 1, 2, \ldots$ Многочастичная волновая функция задается в *представлении чисел заполнения*, указывающем сколько частиц занимают каждое из состояний $\psi_i(x)$. В обозначениях Дирака такие состояния могут быть записаны как $|\ldots, N_{i-1}, N_i, N_{i+1}, \ldots\rangle$, где числа заполнения N_i принимают произвольные целые неотрицательные значения, $N_i = 0, 1, \ldots$ Канонические операторы рождения и уничтожения a_i^+ и a_i вводятся следующим образом:

$$\begin{aligned} a_i|\ldots, N_i, N_{i+1}, \ldots\rangle &= \sqrt{N_i}|\ldots, N_i - 1, N_{i+1}, \ldots\rangle; \\ a_i^+|\ldots, N_i, N_{i+1}, \ldots\rangle &= \sqrt{N_i + 1}|\ldots, N_i + 1, N_{i+1}, \ldots\rangle\,. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Нетрудно проверить, что выполняются коммутационные соотношения:

$$[a_i, a_j^+] = a_i a_j^+ - a_j^+ a_i = \delta_{ij}\,; \quad [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \tag{1.2}$$

Далее, вводятся *ψ-операторы*:

$$\widehat{\psi}(x) = \sum_i \widehat{a}_i \psi_i(x)\ ; \quad \widehat{\psi}^+(x) = \sum_i \widehat{a}_i^+ \psi_i^*(x)\,. \tag{1.3}$$

Функции $\psi_i(x)$ выбирают таким образом, чтобы они образовывали полную ортонормированную систему. При этом коммутационные соотношения ψ-операторов оказываются следующими:

$$[\widehat{\psi}(x), \widehat{\psi}^+(x')] = \delta(x - x')\,, \quad [\widehat{\psi}(x), \widehat{\psi}(x')] = [\widehat{\psi}^+(x), \widehat{\psi}^+(x')] = 0\,. \tag{1.4}$$

В случае ферми-статистики представление чисел заполнения, а также операторы рождения и уничтожения, их коммутационные соотношения и ψ-операторы вводятся сходным образом. Остановимся на отличиях бозевского и фермиевского вторичного квантования. Во-первых, в силу принципа Паули, числа заполнения N_i принимают всего два значения: $N_i = 0, 1$. Поэтому канонические операторы a_i и a_i^+ действуют так:

$$a_i|\ldots, N_i, N_{i+1}, \ldots\rangle = \begin{cases} |\ldots, 0, N_{i+1}, \ldots\rangle & \text{при } N_i = 1, \\ 0 & \text{при } N_i = 0\ ; \end{cases}$$

$$a_i^+|\ldots, N_i, N_{i+1}, \ldots\rangle = \begin{cases} 0 & \text{при } N_i = 1\ , \\ |\ldots, 1, N_{i+1}, \ldots\rangle & \text{при } N_i = 0\ . \end{cases} \tag{1.5}$$

Во-вторых, антисимметрия многочастичного состояния по отношению к перестановке частиц приводит к антикоммутативности a_i и a_j^+:

$$[a_i^+, a_j]_+ = a_i^+ a_j + a_j a_i^+ = \delta_{ij}\ , \quad [a_i, a_j]_+ = [a_i^+, a_j^+]_+ = 0\,. \tag{1.6}$$

Для ψ-операторов (1.3) соотношения антикоммутативности выглядят так:

$$[\widehat{\psi}(x), \widehat{\psi}^+(x')]_+ = \delta(x - x')\ , \quad [\widehat{\psi}(x), \widehat{\psi}(x')]_+ = [\widehat{\psi}^+(x), \widehat{\psi}^+(x')]_+ = 0\,. \tag{1.7}$$

Удобство представления вторичного квантования заключается в том, связь между одно- и многочастичной задачами на языке ψ-операторов оказывается весьма простой. Например, нетрудно проверить, что гамильтониан системы невзаимодействующих бозе- или ферми-частиц, имеющих массу m и движущихся в потенциале $U(\mathbf{r})$, записывается так:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \int \left(-\tfrac{\hbar^2}{2m}\widehat{\psi}^+(\mathbf{r})\nabla^2\widehat{\psi}(\mathbf{r}) + \widehat{\psi}^+(\mathbf{r})\widehat{\psi}(\mathbf{r})U(\mathbf{r})\right) d^3r\,. \tag{1.8}$$

А если частицы взаимодействуют по закону $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, то гамильтониан нужно просто дополнить членом

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int} = \frac{1}{2}\iint \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\widehat{\psi}(\mathbf{r}_2)\widehat{\psi}(\mathbf{r}_1)d^3r_1 d^3r_2\,. \tag{1.9}$$

Вторично квантованный *оператор плотности частиц* $\widehat{\rho}(\mathbf{r}) = \widehat{\psi}^+(\mathbf{r})\widehat{\psi}(\mathbf{r})$ является многочастичным эквивалентом одночастичного выражения $|\psi(\mathbf{r})|^2$ для плотности вероятности. Интеграл от $\widehat{\rho}(\mathbf{r})$, взятый по всему пространству, есть оператор полного числа частиц в системе

$$\widehat{N} = \int \widehat{\psi}^+(\mathbf{r})\,\widehat{\psi}(\mathbf{r})\,d^3r\,. \tag{1.10}$$

Подчеркнем, что все операторы (1.8) — (1.10) в представлении вторичного квантования имеют один и тот же вид и для фермионов, и для бозонов.

Остановимся теперь на важном понятии канонического преобразования и на том, как эти преобразования выглядят в представлении вторичного квантования. Напомним, что в классической механике канонические преобразования фазового пространства $(p, q) \to (p', q')$ вводятся с помощью скобок Пуассона $\{\ldots\}$, причем роль этих преобразований заключается в том, что они сохраняют гамильтонову форму уравнений движения: $\dot{p} = \{p, H\}$, $\dot{q} = \{q, H\}$.

В квантовой механике роль скобок Пуассона переходит к коммутаторам. (Например, в представлении Гейзенберга уравнения движения имеют вид $i\hbar\partial_t\widehat{A} = [\widehat{A}, \widehat{\mathcal{H}}]$.) Поэтому каноническими называют преобразования физических величин, сохраняющие коммутационные соотношения операторов. Как и в классической механике, канонические преобразования важны, поскольку они сохраняют форму уравнений движения.

Подобрав каноническое преобразование, часто возможно перейти от взаимодействующих частиц к невзаимодействующим *квазичастицам.* Наиболее часто рассматривают линейные преобразования канонических операторов (бозонов или фермионов)

$$\tilde{a}_i = \sum_j \left(U_{ij}a_j + V_{ij}a_j^+\right) , \quad \tilde{a}_i^+ = \sum_j \left(V_{ij}^*a_j + U_{ij}^*a_j^+\right) , \tag{1.11}$$

называемые *преобразованиями Боголюбова.* Одной из часто встречающихся задач является отыскание спектра и собственных состояний гамильтониана, квадратичного по операторам рождения и уничтожения. Нетрудно проверить, что произвольный гамильтониан такого вида может быть приведен к диагональной форме с помощью соответствующим образом подобранного преобразования (1.11):

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{ij} h_{ij}^{(1)}a_i^+a_j + h_{ij}^{(2)}a_ia_j + \text{h.c.} = \sum_i \varepsilon_i\tilde{a}_i^+\tilde{a}_i \ + \ \langle 0|\widehat{\mathcal{H}}|0\rangle\,. \tag{1.12}$$

Энергии ε_i дают спектр квазичастиц, а константа $\langle 0|\widehat{\mathcal{H}}|0\rangle$ в правой части представляет собой так называемую энергию нулевых колебаний.

Преобразования (1.11) являются каноническими, если они сохраняют коммутационные соотношения

$$[a_i, a_j]_\pm = 0, \quad [a_i, a_j^+]_\pm = \delta_{ij}\,. \tag{1.13}$$

Соответствующие условия на матрицы U и V в (1.11) в общем случае выглядят так:

$$U_{ki}V_{kj} \pm V_{ki}U_{kj} = 0\,, \quad U_{ki}^*U_{kj} \pm V_{ki}^*V_{kj} = \delta_{ij}\,, \tag{1.14}$$

где знак «+» соответствует случаю ферми-статистики, а знак «−» — случаю бозе-статистики.

Структура преобразований (1.11) для бозе-операторов видна уже в простейшем случае одной бозонной степени свободы (примером является квантово-механический осциллятор). При этом U и V — не матрицы, а числа, и имеется всего два простейших однородных канонических преобразования:

$$\begin{array}{ll} \tilde{a} = \ \text{ch}\,\lambda\ a + \text{sh}\,\lambda\ a^+ \\ \tilde{a}^+ = \ \text{sh}\,\lambda\ a + \text{ch}\,\lambda\ a^+ \end{array}, \qquad \begin{array}{ll} \tilde{a} = \ e^{i\varphi}\,\tilde{a} \\ \tilde{a}^+ = \ e^{-i\varphi}\,\tilde{a}^+ \end{array} . \tag{1.15}$$

где λ и φ — вещественные параметры. Более общие преобразования представляют собой произведение (композицию) преобразований (1.15).

В случае же ферми-статистики линейные канонические преобразования задаются сходным образом. Для одной фермионной степени свободы все линейные канонические преобразования исчерпываются сопряжением, $\widetilde{a} = a^+$, $\widetilde{a}^+ = a$, и умножением на фазовый множитель, $\widetilde{a} = e^{i\varphi}a^+$, $\widetilde{a}^+ = e^{-i\varphi}a$, а преобразования более общего вида в этом случае оказываются нелинейными — см. задачу 3. Более общие линейные преобразования возникают в системе из двух фермионов, например,

$$\begin{array}{l} \widetilde{a} = \cos\theta\ a - \sin\theta\ b^+ \\ \widetilde{b}^+ = \sin\theta\ a + \cos\theta\ b^+ \end{array}, \qquad \begin{array}{l} \widetilde{a}^+ = \cos\theta\ a^+ - \sin\theta\ b \\ \widetilde{b} = \sin\theta\ a^+ + \cos\theta\ b \end{array}, \tag{1.16}$$

где θ — параметр. Интересно, что первое из бозонных преобразований (1.15) есть псевдоевклидово вращение, то есть не что иное, как преобразование Лоренца с быстротой λ в двумерном пространстве–времени, в то время как для фермионов возникают преобразования вида (1.16), соответствующие вращению евклидова пространства.

Возможные канонические преобразования не исчерпываются однородными линейными преобразованиями. Иногда бывают полезны неоднородные линейные преобразования (как в задаче 6) или даже нелинейные преобразования (см. задачу 3, а также раздел 1.4).

Часто встречающаяся разновидность линейных канонических преобразований — фурье-преобразование ψ-операторов:

$$\widehat{\psi}(\mathbf{r}) = \int e^{i\mathbf{pr}}\,\widehat{a}_{\mathbf{p}}\,\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,, \quad \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \int e^{-i\mathbf{pr}}\,\widehat{a}^+_{\mathbf{p}}\,\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,. \tag{1.17}$$

Принято выбирать нормировку операторов $\widehat{a}_{\mathbf{p}}$ и $\widehat{a}^+_{\mathbf{p}}$ так, чтобы

$$[\widehat{a}_{\mathbf{p}_1}, \widehat{a}^+_{\mathbf{p}_2}]_\pm = (2\pi)^3\delta^{(3)}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\,. \tag{1.18}$$

Такой выбор согласуется с определениями (1.4) и (1.7).

Имеется важный для теории твердого тела круг задач, когда ψ-операторы или другие величины заданы на решетке. Фурье-преобразование (1.17) нетрудно распространить на этот случай, заметив, что если $\mathbf{r}$ пробегает узлы некоторой решетки, то $\mathbf{p}$ изменяется внутри периода обратной решетки (или, иначе говоря, внутри зоны Бриллюэна). Скажем, в одном измерении решетка есть $r_n = an$, а зона Бриллюэна — это отрезок $-\pi/a < p < \pi/a$. Такое преобразование используется в задачах 1, 2 и 4.

Литература: Подробное изложение метода вторичного квантования можно найти в [3], гл. VI, а также в [2], § 64, 65 и [1], § 3. Понятие квазичастиц обсуждается в [1], гл. 1 и [6], гл. 1. Канонические преобразования Боголюбова для бозе-частиц рассматриваются в [1], § 4 и [6], § 25, а для ферми-частиц — в [6], § 39.

1.2. Задачи 1 – 4

Задача 1. (*Классическая цепочка осцилляторов*[1].) Рассмотрим цепочку атомов

[1] С рассмотрения этой простейшей модели колебаний решетки начинаются почти все курсы

массы m_i, соединенных одинаковыми пружинками жесткости K:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left[p_i^2/(2m_i) + (K/2)(x_i - x_{i+1})^2\right] \tag{1.19}$$

где $m_i = m$, если i четно, и $m_i = M$, если i нечетно. Определите нормальные моды для этой системы. Покажите, что их две: акустическая и оптическая.

Чему равна скорость звука c? Получится ли такой же ответ, если вычислять c по формуле Лапласа $c = \sqrt{\partial P/\partial \rho}$, где P — давление, а ρ — плотность?

Чему равна ширина щели между оптической и акустической ветвями? Покажите, что при $M \gg m$ дисперсия оптической моды практически отсутствует. Как можно объяснить это качественно?

Задача 2. (*Фермионная цепочка.*) Найдите преобразование Боголюбова, диагонализующее фермионный гамильтониан

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \Big(J_1\, a_i^+ a_{i+1} + J_1\, a_{i+1}^+ a_i + J_2\, a_i a_{i+1} + J_2\, a_{i+1}^+ a_i^+ - 2B\, a_i^+ a_i\Big), \tag{1.20}$$

где $J_{1,2}$ и B — некоторые константы. Такой гамильтониан возникает при рассмотрении одномерной модели квантового магнетика, так называемой «XY-модели»(см. раздел 1.4).

Определите спектр квазичастиц $\varepsilon(k)$ гамильтониана (1.20). Обратите внимание, что при $B = 0$ и $J_1 = J_2$ дисперсия пропадает. Можно ли понять это без вычислений?

Задача 3. (*Нелинейные канонические преобразования.*) Рассмотрим фермиевские операторы a и a^+, действующие в пространстве состояний фермиона, который может заполнять или не заполнять ровно одно состояние. В этом случае пространство многочастичных состояний двумерно и каноническим базисом в нем служат состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$.

Найдите все канонические преобразования операторов a и a^+, сохраняющие соотношения $a^2 = (a^+)^2 = 0$ и $a^+a + aa^+ = 1$. Убедитесь в том, что канонические преобразования наиболее общего вида не описываются линейными соотношениями вида (1.11).

Рассмотрите представление фермиевских операторов спиновыми матрицами Паули:

$$\sigma_x = a + a^+\,, \quad \sigma_y = i(a - a^+)\,, \quad \sigma_z = 2a^+a - 1\,. \tag{1.21}$$

Покажите, что канонические преобразования a и a^+ соответствуют вращениям в спиновом пространстве.

Связь между фермиевскими операторами и операторами спина 1/2 более подробно рассмотрена в разделе 1.4.

Задача 4. (*Квантовая цепочка осцилляторов.*) Пусть теперь гамильтониан (1.19) определяет квантовую задачу, т. е. $p_i = -i\hbar\partial/\partial x_i$. Перейдите к бозонным

физики твердого тела.

операторам рождения и уничтожения:

$$\widehat{x}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{m_i\omega_i}}\,\frac{a_i + a_i^+}{\sqrt{2}}, \quad \widehat{p}_i = \sqrt{\hbar m_i\omega_i}\,\frac{a_i - a_i^+}{i\sqrt{2}}\,. \tag{1.22}$$

Для случая $M = m$ найдите каноническое преобразование, приводящее гамильтониан к диагональному виду. Определите спектр фононов и вычислите энергию нулевых колебаний.

1.3. Решения задач $1-4$

1. Гамильтониан (1.19) приводит к уравнениям движения:

$$m\ddot{x}_i = K\,(y_i + y_{i-1} - 2x_i), \quad M\ddot{y}_i = K\,(x_i + x_{i+1} - 2y_i) \tag{1.23}$$

(x_i — смещение атома массы m в i–й элементарной ячейке, y_i — смещение атома массы M). Будем искать решение в виде плоских волн:

$$x_n = e^{i(qn-\omega t)}\,x_q\,, \quad y_n = e^{i[q(n+1/2)-\omega t]}\,y_q\,. \tag{1.24}$$

Отсюда

$$m\omega^2 x_q = 2Kx_q - 2K\cos(q/2)y_q, \quad M\omega^2 y_q = 2Ky_q - 2K\cos(q/2)x_q. \tag{1.25}$$

(Здесь q — волновой вектор в первой зоне Бриллюэна: $-\pi < q < \pi$.)

Нормальные моды имеют закон дисперсии, определяемый из условия

$$\det\begin{pmatrix} 2K - m\omega^2 & -2K\cos(q/2) \\ -2K\cos(q/2) & 2K - M\omega^2 \end{pmatrix} = 0\,, \tag{1.26}$$

что дает $\omega^4 - (2K/\mu)\omega^2 + (4K^2/mM)\sin^2(q/2) \ = 0$, где $\mu = Mm/(M+m)$. Получаем

$$\omega_\pm^2(q) = \frac{K}{\mu}\,\left(1 \pm \sqrt{1 - \tfrac{4\mu^2}{mM}\sin^2(q/2)}\right) \tag{1.27}$$

Здесь «+» соответствует оптической, а «−» — акустической моде. Дисперсия нормальных мод (1.27) показана на рис. 1.1.

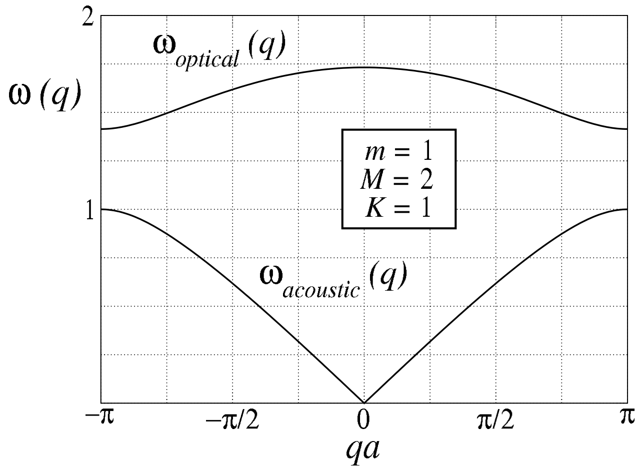


Рис. 1.1

При малых q разлагаем закон дисперсии акустической моды:

$$\omega_-^2(q) = \frac{2K\mu}{mM}(q/2)^2\,, \tag{1.28}$$

и получаем скорость звука:

$$c = (\omega_-/q)\big|_{q\to 0} = \frac{1}{2}\Big(2K/(M+m)\Big)^{1/2}. \tag{1.29}$$

При выводе предполагалось, что период решетки $2a$ равен единице. Чтобы получить выражение, имеющее размерность скорости, надо умножить результат на $2a$, где a — расстояние между атомами M и m. При этом получается скорость $c = a\sqrt{2K/(M+m)}$.

Проверим, что найденная скорость звука согласуется с формулой Лапласа $c^2 = \partial P/\partial\rho$, связывающей скорость звука и сжимаемость системы. Для цепочки длины x, содержащей N атомов каждого типа, сила пропорциональна удлинению, $dP = -(K/2N)dx$ (в одном измерении сила и давление — это одно и то же), а изменение плотности есть

$$d\rho = \frac{d}{dx}\left(\frac{(M+m)N}{x}\right)\,dx = -\frac{(M+m)N}{x_0^2}dx\,, \tag{1.30}$$

где $x_0 = 2Na$. Отсюда получаем $c^2 = 2Ka^2/(M+m)$, как и следовало.

Верхний край акустической ветви спектра:

$$\max[\omega_-^2(q)] = \omega_-^2(\pi) = \frac{K}{\mu}\left(1 - \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{mM}}\right) = \frac{K}{\mu}\left(1 - \frac{M-m}{M+m}\right) = \frac{2K}{M}\,. \tag{1.31}$$

Аналогично, нижний край оптической ветви есть

$$\min[\omega_+^2(q)] = \omega_+^2(\pi) = \frac{2K}{m}\,, \tag{1.32}$$

и поэтому ширина щели $\Delta\omega = \sqrt{2K/m} - \sqrt{2K/M}\,$.

При $M \gg m$ частота оптической ветви

$$\omega_+(q) = \sqrt{\frac{2K}{m}}\left(1 + \frac{m}{2M}\cos^2(q/2) + O\left(\tfrac{m^2}{M^2}\right)\right) \tag{1.33}$$

практически не зависит от q, что соответствует колебаниям легких атомов между почти неподвижными тяжелыми. Физическая причина отсутствия дисперсии — взаимная независимость колебаний соседних атомов массы m. При $M \gg m$ неважно, колеблются ли соседние легкие атомы в фазе или же в противофазе, поскольку через тяжелые стенки (т. е. атомы массы M) влияние не передается.

2. *(Первое решение.)* Сделаем преобразование Фурье $a_m = \int\limits_{-\pi}^{\pi} e^{ikm} a_k \frac{dk}{2\pi}$. При этом члены гамильтониана преобразуются к такому виду:

$$\sum_m a_m^+ a_{m+1} = \sum_k a_k^+ a_k e^{ik}, \qquad \sum_m a_m a_{m+1} = \sum_k a_k a_{-k} e^{-ik}\,,$$
$$\sum_m a_m^+ a_{m+1} + a_{m+1}^+ a_m = \sum_k 2\cos k\, a_k^+ a_k\,, \tag{1.34}$$

где сумма по k есть сокращенное обозначение для $\int\limits_{-\pi}^{\pi} \ldots \frac{dk}{2\pi}$. Пользуясь антикоммутативностью a_k и a_{-k}, перепишем вторую сумму так:

$$\sum_m a_m a_{m+1} = -i\sum_k \sin k\, a_k a_{-k}\,, \tag{1.35}$$

после чего гамильтониан принимает вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_k \Big(2(J_1\cos k - B)\ \ a_k^+ a_k - iJ_2 \sin k\, a_k a_{-k} + iJ_2 \sin k\, a_{-k}^+ a_k^+\Big). \tag{1.36}$$

После «поворота» $a_k = e^{i\pi/4} b_k$, $a_k^+ = e^{-i\pi/4} b_k^+$ гамильтониан становится вещественным:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_k \Big((J_1\cos k - B)\ \ b_k^+ b_k + J_2 \sin k\ \ b_k b_{-k} + \text{h.c.}\Big) \tag{1.37}$$

Будем искать фермионное преобразование Боголюбова в виде

$$\begin{aligned} b_k &= u_k c_k + v_k c_{-k}^+\,, & b_k^+ &= u_k c_k^+ + v_k c_{-k}\,,\\ b_{-k}^+ &= -v_k c_k + u_k c_{-k}^+\,, & b_{-k} &= -v_k c_k^+ + u_k c_{-k} \end{aligned} \tag{1.38}$$

с вещественными u_k и v_k, причем $u_k^2 + v_k^2 = 1$. Получаем

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_k (J_1\cos k - B)\left(u_k^2 c_k^+ c_k + u_k v_k (c_k^+ c_{-k}^+ + c_{-k} c_k) + v_k^2 c_{-k} c_{-k}^+\right) +$$

$$+J_2 \sin k \left(u_k^2 c_k c_{-k} + u_k v_k (c_{-k}^+ c_{-k} - c_k c_k^+) - v_k^2 c_{-k}^+ c_k^+ \right) + \text{h.c.} \tag{1.39}$$

Приравняем коэффициент при $c_{-k}c_k$ нулю, потребовав чтобы

$$2u_k v_k (J_1 \cos k - B) \;\; + (-u_k^2 + v_k^2) J_2 \sin k = 0\,. \tag{1.40}$$

Тогда будем иметь слкдующее

$$\frac{v_k}{u_k} = \frac{B - J_1 \cos k \;\; \pm \sqrt{(J_1 \cos k - B)^2 + J_2^2 \sin^2 k}}{J_2 \sin k}\,. \tag{1.41}$$

Решив это уравнение при условии $u_k^2 + v_k^2 = 1$, найдем значения u_k, v_k и подставим их в гамильтониан:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \text{const} + \sum_k \left[2(J_1 \cos k - B)\ (u_k^2 - v_k^2) + 4J_2 \sin k\, u_k v_k \right] c_k^+ c_k = \\ = \text{const} + \sum_k \varepsilon_k c_k^+ c_k\,. \tag{1.42}$$

Спектр возбуждений, таким образом, есть

$$\varepsilon_k = 2\sqrt{(J_1 \cos k - B)^2 + J_2^2 \sin^2 k}\,. \tag{1.43}$$

Отсутствие дисперсии при $J_1 = J_2$ и $B = 0$ означает, что возбуждения локализованы на одном или нескольких соседних узлах. Это можно понять с точки зрения преобразования Йордана–Вигнера (см. раздел 1.4), которое в данном случае приводит к изинговской спиновой цепочке:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} J_y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y\,. \tag{1.44}$$

В такой цепочке каждый спин характеризуется определенной проекцией на ось y. Поэтому элементарное возбуждение в этой системе — просто переворот спина на любом из узлов, никак не затрагивающий остальные узлы.

Таким образом, полная локализация возбуждения на одном узле эквивалентна отсутствию дисперсии. Обратим внимание на аналогию с задачей 1 в случае $M \gg m$, когда оптическая мода колебаний становится почти бездисперсионной из-за того, что колебания соседних легких атомов почти полностью развязаны.

2. *(Второе решение.)* Приведенное выше решение иллюстрирует стандартный подход к преобразованию Боголюбова. Дадим другое решение, в котором физический смысл вычислений яснее, и сами они — элегантнее. Вернемся к гамильтониану (1.36) и рассмотрим его коммутатор с фермиевскими операторами: $[\widehat{\mathcal{H}}, a_k]$. Пользуясь соотношениями

$$[a^+ a, a] = a^+ a a - a a^+ a = -a\,, \quad [a a^+, a^+] = -a^+\,, \tag{1.45}$$

вычислим коммутатор

$$[\widehat{\mathcal{H}}, a_k] = -2(J_1 \cos k - B)\ a_k + 2J_2 i \sin k\, a^+_{-k}\,. \tag{1.46}$$

(Напомним, что физический смысл коммутатора некоторой величины с гамильтонианом — скорость изменения этой величины: $i\hbar\dot{A} = [A, \mathcal{H}]$.) Теперь рассмотрим каноническое преобразование:

$$a_k = u_k b_k + v_k b^+_{-k}\,, \qquad a^+_{-k} = u^*_k b^+_{-k} - v^*_k b_k\,, \tag{1.47}$$

и предположим, что параметры u_k и v_k выбраны так, что гамильтониан принял диагональную форму

$$\widehat{\mathcal{H}} = E_0 + \sum_k \varepsilon_k b^+_k b_k\,. \tag{1.48}$$

Возьмем коммутаторы

$$[\widehat{\mathcal{H}}, b_k] = -\varepsilon_k b_k\,,\ [\widehat{\mathcal{H}}, b^+_k] = \varepsilon_k b^+_k\,, \tag{1.49}$$

и с их помощью перепишем коммутатор (1.46):

$$-u_k\varepsilon_k b_k + v_k\varepsilon_k b^+_{-k} = -2(J_1\cos k - B)(u_k b_k + v_k b^+_{-k}) + 2J_2 i \sin k(u^*_k b^+_{-k} - v^*_k b_k), \tag{1.50}$$

откуда получаем два уравнения для ε_k, u_k и v_k:

$$u_k\varepsilon_k = 2(J_1\cos k - B)\ u_k + 2J_2 i \sin k\, v^*_k\,, \tag{1.51}$$

$$v_k\varepsilon_k = -2(J_1\cos k - B)\ v_k + 2J_2 i \sin k\, u^*_k\,. \tag{1.52}$$

Так как уравнения однородны по u_k и v_k, выражаем v_k через u_k из (1.52):

$$v_k = \frac{2J_2 i\ \sin k\, u^*_k}{\varepsilon_k + 2(J_1\cos k - B)}\,, \tag{1.53}$$

и затем исключаем v_k из (1.51). Получаем

$$\varepsilon^2_k - 4(J_1\cos k)^2 = 4J_2^2 \sin^2 k\,, \tag{1.54}$$

откуда находим закон дисперсии:

$$\varepsilon_k = 2\sqrt{(J_1\cos k - B)^2 + J_2^2\sin^2 k}\,. \tag{1.55}$$

(Знак перед корнем выбираем, заметив, что энергия возбуждений над основным состоянием всегда положительна.) Параметры преобразования нетрудно найти из (1.53) и условия нормировки $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$.

3. Будем искать каноническое преобразование в таком виде:

$$a' = ua + va^+ + wa^+a + q \tag{1.56}$$

$$a'^+ = u^*a^+ + v^*a + w^*a^+a + q^*\,. \tag{1.57}$$

Это наиболее общая форма, к которой может быть приведено любое полиномиальное по a и a^+ выражение. Убедиться в этом можно следующим образом. Во–первых, с помощью коммутационных соотношений любое выражение может быть приведено к нормальной форме, в которой в каждом слагаемом оператор a^+ (если он есть) стоит слева от a. Во–вторых, поскольку $a^2 = (a^+)^2 = 0$, выражение (1.56) представляет собой нормальную форму наиболее общего вида.

Рассмотрим выражение a'^2. Приведем квадрат правой части выражения (1.56) для a' к нормальной форме и потребуем, чтобы все коэффициенты обратились в нуль. Это дает два условия:

$$w + 2q = 0\,, \quad uv + q^2 = 0\,. \tag{1.58}$$

Аналогично, условие $a'a'^+ + a'^+a' = 1$ приводит к соотношению

$$|u|^2 + |v|^2 + 2|q|^2 = 1\,. \tag{1.59}$$

Из полученных соотношений следует, что

$$|u| + |v| = 1\,. \tag{1.60}$$

Таким образом, наиболее общее каноническое преобразование задается двумя комплексными параметрами u и v, удовлетворяющими условию (1.60). Коэффициенты q и w определяются таким образом: $q = \pm i\sqrt{uv}$, $w = -2q$.

Нетрудно видеть, что в общем случае каноническое преобразование нелинейное, поскольку коэффициент w не обращается в нуль. Более того, линейными оказываются лишь тривиальные преобразования (с u или v равным нулю).

Решим теперь задачу другим способом, воспользовавшись представлением (1.21) фермиевских операторов через матрицы Паули. Обратим соотношения (1.21):

$$a = (\sigma_x - i\sigma_y)/2\,, \quad a^+ = (\sigma_x + i\sigma_y)/2\,. \tag{1.61}$$

Нетрудно проверить, что условия $a^2 = (a^+)^2 = 0$, $a^+a + aa^+ = 1$ эквивалентны соотношениям антикоммутативности для σ_i:

$$[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij}\,. \tag{1.62}$$

Преобразования, сохраняющие соотношения (1.62), можно записать в виде

$$\sigma_i' \;=\; R_{ij}\,\sigma_j\,, \tag{1.63}$$

где R_{ij} — вещественная ортогональная матрица 3×3. Поэтому канонические преобразования в данном случае образуют группу SO(3).

4. *(Первое решение.)* Выразим $\widehat{\mathcal{H}}$ через a_i и a_i^+ по формулам (1.22), не определяя пока частоту ω_0:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}} = \sum \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{K}{2}(x_i - x_{i+1})^2 \right) = -\sum \Bigg[\frac{\hbar\omega_0}{4}(a_i - a_i^+)^2 + \\ + \frac{K\hbar}{4m\omega_0}(a_i + a_i^+ - a_{i+1} - a_{i+1}^+)^2 \Bigg] = \sum \Bigg[\frac{\hbar\omega_0}{4}(a_i^+a_i - a_i^2) + \\ + \frac{\hbar K}{4m\omega_0}\Big((a_i - a_{i+1})(a_i^+ - a_{i+1}^+) + (a_i - a_{i+1})^2 \Big) + \text{h.c.} \Bigg] \end{aligned} \tag{1.64}$$

(с точностью до константы, возникающей из-за коммутационных соотношений бозе-операторов). Выполним преобразование Фурье:

$$a_m = \int_{-\pi}^{\pi} a_k\, e^{ikm} \frac{dk}{2\pi} = \sum_k a_k\, e^{ikm}\,, \quad a_k = \sum_m a_m\, e^{-ikm}\,. \tag{1.65}$$

При этом

$$a_i - a_{i+1} \,\to\, (1 - e^{ik}) a_k\,, \quad a_i^+ - a_{i+1}^+ \,\to\, (1 - e^{-ik}) a_k^+\,. \tag{1.66}$$

Подставляя эти выражения в (1.64), получаем

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_k \Big(p(k)\, a_k^+ a_k \,+\, q(k)\, a_k a_{-k} \,+\, \text{h.c.} \Big)\,, \tag{1.67}$$

где

$$p(k) = \frac{\hbar\omega_0}{4} \,+\, \frac{\hbar K}{2m\omega_0}(1 - \cos k), \quad q(k) = \frac{\hbar K}{2m\omega_0}(1 - \cos k) \,-\, \frac{\hbar\omega_0}{4}\,. \tag{1.68}$$

Рассмотрим каноническое преобразование:

$$a_k = u_k b_k + v_k b_{-k}^+, \quad a_{-k}^+ = v_k b_k + u_k b_{-k}^+\,, \tag{1.69}$$

где $u_k = \operatorname{ch}\lambda_k$, $v_k = \operatorname{sh}\lambda_k$. Нетрудно проверить, что при преобразовании (1.69) гамильтониан сохраняет свой вид, причем $p(k)$ и $q(k)$ меняются так:

$$\begin{aligned} p'(k) \,&=\, \operatorname{ch} 2\lambda_k\ p(k) \,+\, \operatorname{sh} 2\lambda_k\ q(k)\,, \\ q'(k) \,&=\, \operatorname{sh} 2\lambda_k\ p(k) \,+\, \operatorname{ch} 2\lambda_k\ q(k)\,. \end{aligned} \tag{1.70}$$

Подберем λ_k так, чтобы $q'(k)$ обратилось в нуль:

$$\operatorname{th} 2\lambda_k \,=\, -q(k)/p(k)\,. \tag{1.71}$$

При этом $p'(k) = \sqrt{p^2(k) - q^2(k)} = \hbar\sqrt{K/m}\sin|k/2|$. Обратим внимание на то, что частота ω_0, значение которой может быть произвольным, выпадает из выражения для $p'(k)$ (но не из выражения для λ_k!).

Диагонализованный гамильтониан имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_k \Big(p'(k)\, b_k^+ b_k \,+\, \text{h.c.} \Big) \,=\, \sum_k \omega(k) \left(b_k^+ b_k \,+\, \frac{1}{2} \right)\,, \tag{1.72}$$

где $\omega(k) = 2p'(k) = 2\hbar\sqrt{K/m}\,\sin|k/2|$.

Выражение (1.72) позволяет найти энергию нулевых колебаний, приходящуюся на одну частицу:

$$E_0 \,=\, \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\hbar\omega(k)}{2} \frac{dk}{2\pi} \,=\, \frac{2}{\pi}\,\hbar\sqrt{K/m}\,. \tag{1.73}$$

4. *(Второе решение.)* К ответу можно прийти заметно быстрее, если не фиксировать внимание на операторах рождения и уничтожения. Чтобы получить каноническое преобразование, достаточно проверить сохранение коммутационных соотношений для любой полной системы операторов. В этой задаче наиболее естественный выбор — координаты и импульсы частиц.

Сделаем преобразование Фурье

$$\widehat{x}_m = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \widehat{x}_q \, e^{imq} \, \frac{dq}{2\pi} \,, \quad \widehat{p}_m = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \widehat{p}_q \, e^{imq} \, \frac{dq}{2\pi} \,, \tag{1.74}$$

и проверим, что коммутационные соотношения не нарушаются:

$$[\widehat{x}_q, \widehat{p}_{q'}] = 2\pi i\hbar \, \delta(q+q') \,. \tag{1.75}$$

Переписывая гамильтониан, имеем

$$\widehat{\mathcal{H}} = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{1}{2m} \widehat{p}_q \widehat{p}_{-q} + \frac{K}{2} \, (2 - 2\cos q) \, \widehat{x}_q \widehat{x}_{-q} \right] \, \frac{dq}{2\pi} \,, \tag{1.76}$$

т. е. каждой фурье-гармонике соответствует осциллятор с частотой

$$\omega(q) = \sqrt{(K/m)\,(2 - 2\cos q)} = 2\sqrt{K/m} \, \sin|q/2| \,. \tag{1.77}$$

Положив

$$\widehat{x}_q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega(q)}} \, \frac{b_q + b^+_{-q}}{\sqrt{2}} \,, \quad \widehat{p}_q = \sqrt{\hbar m \omega(q)} \, \frac{b_q - b^+_{-q}}{i\sqrt{2}} \,, \tag{1.78}$$

снова приходим к гамильтониану (1.72):

$$\widehat{\mathcal{H}} = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \hbar\omega(q) \, \left(b^+_q b_q + \frac{1}{2} \right) \, \frac{dq}{2\pi} \,. \tag{1.79}$$

и к выражению (1.73) для энергии нулевых колебаний.

Из хода решения очевидно, что и для неравных масс $m \neq M$ спектр квантовой цепочки будет связан с частотами колебаний классической цепочки точно так же: каждой классической нормальной моде соответствует квантовый осциллятор.

1.4. От спиновых операторов — к фермиевским

Здесь мы рассмотрим одно интересное применение канонических преобразований из теории одномерных магнитных систем. Одномерный магнетик в простейшем случае представляет собой цепочку спинов 1/2, в которой взаимодействуют только соседние спины. Как мы увидим, с помощью специального обобщения полученных в задаче 3 соотношений между фермионными операторами и матрицами Паули оказывается возможным перейти от одномерной спиновой цепочки к эквивалентной фермионной цепочке. Соответствующие правила перехода называются *преобразованиями Йордана–Вигнера*. Гамильтониан одномерного магнетика со спином 1/2 имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left(J_x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J_y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + J_z \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - B \sigma_i^z \right) . \tag{1.80}$$

Здесь σ_i^α — матрицы Паули; J_x, J_y, J_z — обменные константы; B — внешнее магнитное поле, приложенное вдоль оси z. В обычной изотропной модели Гейзенберга константы J_x, J_y и J_z одинаковы, но нам будет полезно рассмотреть более общий анизотропный случай.

Преобразование Йордана–Вигнера выражает спиновые операторы $\sigma_i^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_i^x \pm i\sigma_i^y)$ через операторы фермионов a_i^+, a_i по следующему правилу:

$$\sigma_i^z = 2a_i^+ a_i - 1, \quad \sigma_i^- = a_i \prod_{j<i} \sigma_j^z, \quad \sigma_i^+ = a_i^+ \prod_{j<i} \sigma_j^z, \tag{1.81}$$

т. е. каждый спин заменяется на фермион и «струну», идущую влево до бесконечности (струной принято называть фигурирующее в (1.81) бесконечное произведение). Цель введения струны состоит в том, чтобы перейти к операторам с фермиевским правилом коммутации. Для этого необходимо «подправить» коммутационные соотношения спиновых операторов на разных узлах. На одном узле, согласно задаче 3, коммутационные соотношения и так фермиевские ($\sigma^+ \to a^+$, $\sigma^- \to a$). На разных же узлах спиновые операторы коммутируют, но после умножения на оператор струны $\prod_{j<i} \sigma_j^z$ они становятся антикоммутирующими.

Нетрудно написать обратное преобразование, выражающее фермиевские операторы через спины:

$$a_i = \sigma_i^- \prod_{j<i} \sigma_i^z , \quad a_i^+ = \sigma_i^+ \prod_{j<i} \sigma_i^z . \tag{1.82}$$

Найдем как спиновый гамильтониан (1.80) выражается через йордан-вигнеровские фермионы. С помощью преобразования (1.81) гамильтониан (1.80) превращается в эквивалентный фермионный гамильтониан

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left[\left(J_1 a_i^+ a_{i+1} + J_2 a_i a_{i+1} + \text{h.c.} \right) + J_z (2n_i - 1)(2n_{i+1} - 1) - B(2n_i - 1) \right] , \tag{1.83}$$

где $n_i = a_i^+ a_i$, $J_1 = -J_x - J_y$, $J_2 = J_x - J_y$. Нетрудно видеть, что при $J_z = 0$ гамильтониан (1.83) с точностью до константы совпадает с рассмотренным в задаче 2 гамильтонианом (1.20). Метод задачи 2 позволяет диагонализовать гамильтониан (1.80) при $J_z = 0$. С помощью канонического преобразования ферми-операторов гамильтониан (1.83) можно привести к виду

$$\widehat{\mathcal{H}} = \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(k)\, \tilde{a}_k^+ \tilde{a}_k \, \frac{dk}{2\pi} , \quad \varepsilon(k) = \pm 2\sqrt{(J_1 \cos k - B)^2 + J_2^2 \sin^2 k} \, . \tag{1.84}$$

Можно сделать вывод, что и в присутствии магнитного поля элементарные возбуждения в спиновой цепочке с $J_z = 0$ подчиняются *ферми-статистике*. Оказывается, это верно и при произвольном J_z, хотя решить задачу в этом случае уже не так просто.

Появление ферми-статистики может показаться парадоксальным, поскольку магноны (спиновые возбуждения в магнетиках) обычно являются бозонами. Однако здесь следует иметь в виду, что речь в данном случае идет о сильно взаимодействующей системе. В магнетике со спином на узле 1/2 между магнонами возникает большое эффективное отталкивание, поскольку никакие два магнона не могут одновременно оказаться на одном и том же узле. Именно это отталкивание и «моделирует» ферми-статистика. Таким образом, рассматриваемая система представляет пример того, как отталкивание между бозонами приводит к появлению квазичастиц, являющихся невзаимодействующими фермионами[2].

С помощью фермионного представления одномерного магнетика можно решить разнообразные задачи. Например, найдем как намагниченность системы и магнитная восприимчивость зависят от приложенного поля. Для простоты ограничимся симметричным случаем: $J_x = J_y = -\frac{1}{2}J < 0$, $J_z = 0$. Эквивалентный фермионный гамильтониан в этом случае принимает вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \int\limits_{-\pi}^{\pi} 2(J\cos k - B)\ a_k^+ a_k\ \frac{dk}{2\pi}\,, \tag{1.85}$$

причем $J > 0$. Магнитный момент направлен вдоль оси z. Намагниченность, приходящаяся на узел, есть

$$\mu = \langle \sigma_i^z \rangle = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \Big(2\langle a_k^+ a_k \rangle - 1 \Big)\ \frac{dk}{2\pi}\,. \tag{1.86}$$

С учетом (1.85) находим

$$\mu = \begin{cases} (2/\pi)\arcsin B/J & \text{при } |B| < J, \\ \operatorname{sign} B/J & \text{при } |B| > J. \end{cases} \tag{1.87}$$

При $|B| = J$ происходит полное намагничивание системы. Нетрудно найти восприимчивость:

$$\chi = \frac{\partial \mu}{\partial B} = \begin{cases} (2/\pi)(J^2 - B^2)^{-1/2} & \text{при } |B| < J \\ 0 & \text{при } |B| > J \end{cases}\,. \tag{1.88}$$

Знак восприимчивости парамагнитный.

[2]Оказывается, что низкая размерность системы усиливает эффекты взаимодействия и, как правило, способствует превращению различных типов статистики друг в друга. Как мы увидим в гл. 12, в одномерной системе взаимодействующих фермионов квазичастицы подчиняются бозе-статистике.

Глава 2.

Функция Грина

2.1. Представление взаимодействия. Хронологическое упорядочение

В теории возмущений гамильтониан записывают в виде $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}$, где $\widehat{\mathcal{H}}_0$ — невозмущенная часть, а $\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ — возмущенная. Наиболее удобно работать в представлении взаимодействия, т. е. в представлении Гейзенберга невозмущенной задачи. В качестве базиса этого представления используются зависящие от времени собственные состояния невозмущенного гамильтониана $\widehat{\mathcal{H}}_0$:

$$|\alpha\rangle(t) = e^{-(i/\hbar)E_\alpha t}|\alpha\rangle\,, \tag{2.1}$$

где E_α — спектр $\widehat{\mathcal{H}}_0$. Уравнение Шредингера, записанное в этом базисе, принимает вид

$$i\hbar\,\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)\,\tilde{\psi}\,, \tag{2.2}$$

где $\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t) = e^{(i/\hbar)\widehat{\mathcal{H}}_0 t}\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}e^{-(i/\hbar)\widehat{\mathcal{H}}_0 t}$, а обозначение $\tilde{\psi}$ указывает, что ψ берется в представлении взаимодействия. Формальное решение записывается через S-матрицу, $\tilde{\psi}(t) = \widehat{S}(t)\tilde{\psi}(0)$, которая дается так называемой хронологической экспонентой:

$$\begin{aligned}\widehat{S}(t) &= \mathrm{T}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t')dt'\right] = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int\limits_0^t\int\limits_0^{t_1}\dots\int\limits_0^{t_{n-1}} \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t_1)\dots\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t_n)\,dt_n\dots dt_1\,,\end{aligned} \tag{2.3}$$

где $0 < t_n < \ldots < t_1 < t$. Преобразования (2.1)–(2.3) имеют общий квантово–механический характер: они применимы и к одночастичной и к многочастичной задачам. В многочастичном случае, представляющем основной интерес, необходимо перейти к ψ-операторам, после чего члены ряда (2.3) становятся полиномами по операторам рождения и уничтожения. Анализ операторной структуры этих выражений приводит к простым правилам вычисления средних (теорема Вика) и к *диаграммной технике*, дающей удобное графическое представление для разложения S-матрицы в ряд по взаимодействию.

Введем *хронологическое произведение* операторов, которое часто называют также Т-упорядоченным произведением операторов, или просто Т-произведением. Для бозе-операторов

$$\mathrm{T}\widehat{A}(x)\widehat{B}(x') = \begin{cases} \widehat{A}(x)\widehat{B}(x') & \text{если } t > t', \\ \widehat{B}(x')\widehat{A}(x) & \text{если } t < t', \end{cases} \tag{2.4}$$

в то время как для ферми-операторов

$$\mathrm{T}\widehat{A}(x)\widehat{B}(x') = \begin{cases} \widehat{A}(x)\widehat{B}(x') & \text{при } t > t', \\ -\widehat{B}(x')\widehat{A}(x) & \text{при } t < t'. \end{cases} \tag{2.5}$$

Иначе говоря, при Т-упорядочении операторов их переставляют так, чтобы моменты времени, в которые взяты операторы, возрастали справа налево. При этом знак перестановки соответствует их коммутационным соотношениям: «+» для бозонов, «−» для фермионов.

С помощью Т-произведения операторов можно записать выражение (2.3) для хронологической экспоненты в более привычном виде:

$$\widehat{S}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!}\, \mathrm{T} \left(\int_0^t \widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t')dt'\right)^n . \tag{2.6}$$

Основным объектом диаграммной техники является функция Грина. Она определяется через ψ-операторы, взятые в представлении взаимодействия:

$$\tilde{\psi}_\alpha(x) = e^{i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}\, \widehat{\psi}_\alpha(\mathbf{r})\, e^{-i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}, \quad \tilde{\psi}^+_\alpha(x) = e^{i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}\, \widehat{\psi}^+_\alpha(\mathbf{r})\, e^{-i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}, \tag{2.7}$$

где под x понимается совокупность четырех переменных — координат $\mathbf{r}$ и времени t; α — спиновый индекс (для фермионов).

Так называемая *причинная функция Грина* есть среднее от хронологического произведения ψ-операторов, взятых в представлении взаимодействия[1]:

$$G^c_{\alpha\beta}(x, x') = -i\langle \mathrm{T}\, \tilde{\psi}_\alpha(x)\, \tilde{\psi}^+_\beta(x')\rangle\,, \tag{2.8}$$

где скобки $\langle \ldots \rangle$ означают матричный элемент $\langle\widehat{S}_0\rangle^{-1}\langle 0|\ldots|0\rangle$, взятый по основному состоянию системы с гамильтонианом $\widehat{\mathcal{H}}_0$. (Фазовый множитель $\langle\widehat{S}_0\rangle = \langle 0|e^{-i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}|0\rangle_{t\to\infty}$ принято вводить для нормировки.) Таким образом, функции Грина бозонов и фермионов определяются одинаково, но операция Т-упорядочения имеет разный смысл.

[1]Верхний индекс у $G^c_{\alpha\beta}$ (первую букву слова «causal») используют для того, чтобы отличать причинную функцию Грина от других полезных функций Грина, таких как запаздывающая и опережающая функции $G^{R(A)}_{\alpha\beta}$ (см. (5.6)).

В выражении (2.7) и всюду далее там, где это не приводит к недоразумениям, мы используем систему единиц, в которой $\hbar = 1$, $[t] = [E]^{-1}$. Кроме того, мы также часто будем писать ψ вместо $\tilde{\psi}$, ибо основную роль в диаграммной технике играет именно операторы $\tilde{\psi}$ в представлении взаимодействия, а операторы ψ в шредингеровском представлении практически не встречаются.

В однородной системе (скажем, в газе или в жидкости) функция Грина (2.8), очевидно, зависит только от разности координат $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и времен $t - t'$. В этом случае удобно сделать преобразование Фурье и перейти в импульсно-частотное представление:

$$G_{\alpha\beta}(x - x') = \iint G_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{p})\, e^{-i\varepsilon(t-t')+i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\, \frac{d\varepsilon\, d^3p}{(2\pi)^4}\,. \tag{2.9}$$

В этом представлении обычно и строится диаграммная техника. Функцию $G_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{p})$ для идеального газа нетрудно найти, пользуясь определением (2.8). Например, для идеального ферми-газа она имеет вид

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i0\, \mathrm{sign}(|\mathbf{p}| - p_0)}\,, \tag{2.10}$$

где $\xi(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m - E_F$ — закон дисперсии, а $p_0 = \sqrt{2mE_F}$ — импульс Ферми, являющийся границей распределения ферми-частиц по импульсам.

Функцию Грина, если она известна, можно использовать для вычисления различных физических величин. Нетрудно проверить, что величина

$$\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \pm i \lim_{t' \to t+0} G_{\alpha\beta}(x, x') \tag{2.11}$$

есть одночастичная матрица плотности. (Знак соответствует статистике: «+» для бозонов, «−» для фермионов.) Зная $\rho_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$, нетрудно найти среднее любой величины. Например, плотность частиц выражается через функцию Грина как

$$n(x) = \pm i \lim_{\substack{t' \to t+0 \\ \mathbf{r}' \to \mathbf{r}}} \mathrm{Tr}\; G_{\alpha\beta}(x, x')\,, \tag{2.12}$$

а плотность тока как

$$\mathbf{j}(x) = \pm \frac{\hbar}{2m} \lim_{\substack{t' \to t+0 \\ \mathbf{r}' \to \mathbf{r}}} (\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'})\; \mathrm{Tr}\; G_{\alpha\beta}(x, x')\,, \tag{2.13}$$

где Tr обозначает взятие следа по спиновым индексам α, β. Брать предел по $t' > t$ в соотношениях (2.11) – (2.13) необходимо из-за неоднозначности определения функции Грина при $t = t'$.

Представление взаимодействия и функция Грина являются основой при построении и использовании диаграммной техники. В этой главе собраны задачи, иллюстрирующие эти важные понятия на простых примерах.

Литература: Представление взаимодействия рассматривается в [1], § 6; [6], § 12. Определение функции Грина можно найти в [1], § 7; [6], § 7.

2.2. Задачи 5 – 10

Задача 5. (*Спин во вращающемся поле.*) Частица со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ находится в постоянном вертикальном и вращающемся горизонтальном магнитном полях[2]

$$B = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0) \,. \tag{2.14}$$

Запишите уравнение Шредингера в представлении взаимодействия, считая переменную часть поля «возмущением». Решите уравнение и найдите S-матрицу.

Пусть при $t = 0$ частица находится в состоянии «спин вверх». Какова вероятность найти ее в состоянии «спин вниз» в момент $t > 0$? Рассмотрите отдельно случай резонанса $\omega = 2\mu B_0$.

Задача 6. Заряженная частица массы m движется по прямой в параболическом потенциале $U(x) = m\omega^2 x^2/2$. На короткое время τ включают слабое электрическое поле E, а затем выключают. Какова вероятность перевести частицу в состояние $|n\rangle$, если до включения поля она была в основном состоянии?

а) Решите задачу в представлении взаимодействия. Обратите внимание на то, что матричные элементы возмущения отличны от нуля только между соседними уровнями. Следовательно, при малом E вероятность перехода в n–е состояние дается n–м порядком теории возмущений. При каком соотношении между E, ω и τ теория возмущений работает?

б)* Для произвольных E и τ найдите *точную* S-матрицу и вероятность перехода из основного в n–е состояние.

Задача 7. (*Обход полюса.*) Выразите плотность n ферми-газа через функцию Грина $G(\varepsilon, p)$, воспользовавшись соотношением (2.12). Вычислите интеграл и получите формулу $p_0^3 = 3\pi^2 n$ для импульса Ферми p_0.

Задача 8. а) Для невзаимодействующих ферми-частиц на прямой найдите функцию Грина $G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x')$.

б) То же для ферми-частиц на полупрямой $x > 0$ с граничным условием $\psi|_{x=0} = 0$ (непроницаемая твердая стенка).

в) (*Осцилляции Фриделя.*) В случае б) покажите, что плотность ферми-газа, как функция расстояния до стенки, осциллирует. Чему равен период осцилляций?

Задача 9. (*Возврат назад при случайном блуждании.*) Функции Грина оказываются полезными и при изучении вопросов, не имеющих отношения к квантовой механике. В этой и следующей задачах мы приведем два таких примера. Первый из них — задача о случайном блуждании.

Рассмотрим частицу, совершающую случайное блуждание по n-мерной кубической решетке. Движение начинается при $t = 0$ из начала координат. Попав на очередном шаге в какой-то из узлов решетки, частица на следующем шаге с одинаковой вероятностью переходит в любой из $2n$ соседних узлов. Пусть $p(t, \mathbf{x})$ — вероятность того, что частица через t шагов оказалась в узле $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ решетки. (В этой

[2]Такая ситуация возникает, например, в эксперименте по ядерному магнитному резонансу (ЯМР).

задаче время t является дискретным.) В теории вероятностей рассматривают *производящую функцию*

$$G(z,\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{x},t} z^t\, e^{i\mathbf{qx}}\, p(t,\mathbf{x}) \qquad (t \geqslant 0,\ |z| < 1)\,. \tag{2.15}$$

Свойства этой величины во многом аналогичны свойствам функции Грина. Покажите, что

$$G(z,\mathbf{q}) = \frac{1}{1 - zW(\mathbf{q})}\,, \qquad W(\mathbf{q}) = \frac{1}{n}(\cos q_1 + \ldots + \cos q_n)\,. \tag{2.16}$$

Рассмотрим производящую функцию $\tilde{G}(z,\mathbf{q})$ для блужданий, начинающихся из начала координат, но ни разу не возвращающихся туда на последующих шагах. Величина $\tilde{G}(z,\mathbf{q})$ по своим свойствам похожа на функцию Грина частицы в поле отталкивающего центра (см. задачи 11, 12 и 13). В частности, для нее можно написать такое же интегральное уравнение (напоминающее уравнение Дайсона). Выразите $\tilde{G}(z,\mathbf{q})$ через $G(z,\mathbf{q})$. Найдите вероятность P того, что частица никогда не возвращается в начало координат. Покажите, что

$$P^{-1} = \int G(1,\mathbf{q})\,\frac{d^n q}{(2\pi)^n}\,. \tag{2.17}$$

Здесь интеграл берется по зоне Бриллюэна, т. е. по периоду обратной решетки.

Вероятность возврата (2.17) имеет нетривиальную зависимость от размерности решетки n. Покажите, что

а) $P = 0$ при $n \leqslant 2$;

б) $0 < P < 1$ при $n > 2$;

в) $P \to 1$ при $n \gg 2$.

Поскольку перечисленные свойства чувствительны только к поведению $G(1,\mathbf{q})$ при малых $\mathbf{q}$, т. е. на больших масштабах, они имеют место для произвольного диффузионного движения, а не только для блуждания по решетке. Типичная диффузионная траектория имеет бесконечно много возвратов при $n \leqslant 2$, и конечное число при $n > 2$.

Задача 10. Второй пример использования функций Грина — из электродинамики. Рассмотрим модель проводящей среды, представляющую собой n-мерную сетку из одинаковых сопротивлений. Сетка образует n-мерную кубическую решетку, сопротивление каждого ребра которой равно R. Обозначим через $R_{\mathbf{x}}$ полное сопротивление решетки между узлами 0 и $\mathbf{x}$. Покажите, что

$$R_{\mathbf{x}} = \frac{R}{n}\int (1 - e^{i\mathbf{qx}})\, G(1,\mathbf{q})\frac{d^n q}{(2\pi)^n}\,, \tag{2.18}$$

где $G(z,\mathbf{q})$ — функция Грина, введенная в задаче 9. Исследуйте поведение $R_{\mathbf{x}}$ при $|\mathbf{x}| \gg 1$ в зависимости от размерности n.

2.3. Решения задач 5 – 10

5. Представим гамильтониан в виде $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$, где

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 = \mu B_0 \sigma_z = \begin{pmatrix} \mu B_0 & 0 \\ 0 & -\mu B_0 \end{pmatrix}, \tag{2.19}$$

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \mu B_1 (\sigma_x \cos\omega t + \sigma_y \sin\omega t) = (\, 0 \quad \mu B_1 e^{-i\omega t} \mu B_1 e^{i\omega t} \quad 0\,) \tag{2.20}$$

В представлении взаимодействия $i\dot{\psi} = \widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}(t)\psi$, где

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}(t) = e^{i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} e^{-i\widehat{\mathcal{H}}_0 t} = \begin{pmatrix} e^{i\mu B_0 t} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu B_0 t} \end{pmatrix} \widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} \begin{pmatrix} e^{-i\mu B_0 t} & 0 \\ 0 & e^{i\mu B_0 t} \end{pmatrix} = \\ = \mu B_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\Omega t} \\ e^{2i\Omega t} & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.21}$$

где $\Omega = \omega/2 - \mu B_0$. Отсюда получаем уравнения

$$i\dot{\psi}_\uparrow = \mu B_1 e^{-2i\Omega t}\psi_\downarrow, \quad i\dot{\psi}_\downarrow = \mu B_1 e^{2i\Omega t}\psi_\uparrow \tag{2.22}$$

Введем новые переменные:

$$\varphi_\uparrow = e^{i\Omega t}\psi_\uparrow, \quad \varphi_\downarrow = e^{-i\Omega t}\psi_\downarrow. \tag{2.23}$$

Уравнения для $\varphi_\alpha(t)$ не содержат явной зависимости от времени:

$$i\dot{\varphi}_\uparrow + \Omega\varphi_\uparrow = \mu B_1 \varphi_\downarrow, \quad i\dot{\varphi}_\downarrow - \Omega\varphi_\downarrow = \mu B_1 \varphi_\uparrow, \tag{2.24}$$

или

$$i\dot{\varphi} = \begin{pmatrix} -\Omega & \mu B_1 \\ \mu B_1 & \Omega \end{pmatrix} \varphi. \tag{2.25}$$

Общее решение этих уравнений имеет вид

$$\varphi(t) = c_+ \begin{pmatrix} (1+\lambda)^{1/2} \\ -(1-\lambda)^{1/2} \end{pmatrix} e^{i\tilde{\omega}t} + c_- \begin{pmatrix} (1-\lambda)^{1/2} \\ (1+\lambda)^{1/2} \end{pmatrix} e^{-i\tilde{\omega}t}, \tag{2.26}$$

где $\tilde{\omega} = \sqrt{\Omega^2 + (\mu B_1)^2}$, $\lambda = \Omega/\tilde{\omega}$, а коэффициенты $c_\pm$ зависят от начальных условий.

Полная S-матрица определяется из $\psi_i(t) = \widehat{S}(t)\psi_i(0)$. Сравнивая с (2.26), получаем

$$\widehat{S}(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\Omega t} & 0 \\ 0 & e^{i\Omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (1+\lambda)^{1/2} e^{i\tilde{\omega}t} & (1-\lambda)^{1/2} e^{-i\tilde{\omega}t} \\ -(1-\lambda)^{1/2} e^{i\tilde{\omega}t} & (1+\lambda)^{1/2} e^{-i\tilde{\omega}t} \end{pmatrix} \times \tag{2.27}$$
$$\times \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1+\lambda)^{1/2} & -(1-\lambda)^{1/2} \\ (1-\lambda)^{1/2} & (1+\lambda)^{1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W(t) e^{-i\Omega t} & -i(1-\lambda^2)^{1/2} e^{-i\Omega t} \sin\tilde{\omega}t \\ -i(1-\lambda^2)^{1/2} e^{i\Omega t} \sin\tilde{\omega}t & W^*(t) e^{i\Omega t} \end{pmatrix},$$

где $W(t) = \cos\tilde{\omega}t + i\lambda\sin\tilde{\omega}t$.

Рассмотрим теперь вероятность переворота спина. Ее можно найти с помощью S-матрицы, а можно и прямо из (2.26). Воспользуемся вторым способом. Поскольку при $t=0$ $\varphi=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, то коэффициенты $c_\pm$ в выражении (2.26) есть $c_+=(1+\lambda)^{1/2}/2$, $c_-=(1-\lambda)^{1/2}/2$. Отсюда

$$\varphi_\downarrow(t)=\frac{1}{2}\sqrt{1-\lambda^2}(e^{-i\tilde\omega t}-e^{i\tilde\omega t})=\frac{\mu B_1}{i\tilde\omega}\sin\tilde\omega t\,. \tag{2.28}$$

Вероятность обнаружения состояния $|\downarrow\rangle$ при $t>0$ равна

$$p_\downarrow(t)=|\varphi_\downarrow(t)|^2=\frac{(\mu B_1)^2}{\Omega^2+(\mu B_1)^2}\sin^2\tilde\omega t\,. \tag{2.29}$$

Если выполнено условие резонанса $\omega=2\mu B_0$, то $\Omega=0$, $\tilde\omega=\mu B_1$ и выражение для S-матрицы упрощается:

$$\widehat{S}(t)=\begin{pmatrix}\cos\mu B_1 t & -i\sin\mu B_1 t\\ -i\sin\mu B_1 t & \cos\mu B_1 t\end{pmatrix}. \tag{2.30}$$

Соответственно, в этом случае вероятность переворота спина есть $p_\downarrow(t)=\sin^2\mu B_1 t$.

6 а. В представлении взаимодействия $\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}=-eEe^{i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}\widehat{x}e^{-i\widehat{\mathcal{H}}_0 t}$, откуда

$$\langle m|\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)|n\rangle=-eEe^{i(m-n)\omega t}\langle m|\widehat{x}|n\rangle\,. \tag{2.31}$$

Воспользуемся известными матричными элементами оператора координаты:

$$\langle m|\widehat{x}|n\rangle=l_0\langle m|a+a^+|n\rangle=l_0\Big(\delta_{m,n+1}\,\sqrt{m}+\delta_{m+1,n}\,\sqrt{n}\Big), \tag{2.32}$$

где $l_0=\sqrt{\hbar/2m\omega}$ — размер основного состояния осциллятора. Получаем

$$\langle m|\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)|n\rangle=-eEl_0\Big(\delta_{m,n+1}\,\sqrt{m}\,e^{i\omega t}+\delta_{m+1,n}\,\sqrt{n}\,e^{-i\omega t}\Big)\,. \tag{2.33}$$

Теперь рассмотрим зависимость вектора состояния от времени. Из уравнения Шредингера в представлении взаимодействия, $i\hbar\dot\psi=\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}\psi$, получаем

$$\psi(t)=\psi(0)-\frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t')\psi(t')dt'\,. \tag{2.34}$$

Из такой записи видно, что проекция $\langle n|\psi(t)\rangle$ отлична от нуля только начиная с n-го порядка теории возмущений. Поэтому

$$\langle n|\psi^{(n)}(t)\rangle=-i\int\limits_0^t\langle n|\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t')|\psi^{(n-1)}(t')\rangle dt'=\frac{ieEl_0}{\hbar}\sqrt{n}\int\limits_0^t e^{i\omega t'}\langle n-1|\psi^{(n-1)}(t')\rangle dt'\,, \tag{2.35}$$

где индекс (n) состояния $\psi^{(n)}(t)$ означает порядок теории возмущений. Вводя функции $u_n(t)=\langle n|\psi^{(n)}(t)\rangle$, получаем рекуррентные уравнения:

$$u_n(t)=\frac{ieEl_0}{\hbar}\sqrt{n}\int\limits_0^t e^{i\omega t'}u_{n-1}(t')dt'\,, \tag{2.36}$$

причем $u_0(t) = 1$. Решив их, находим

$$u_n(t) = \left(\frac{eEl_0}{\hbar\omega}\right)^n \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(e^{i\omega t} - 1\right)^n. \tag{2.37}$$

Искомая вероятность $W_{0\to n}$ в приближении теории возмущений равна

$$|u_n(\tau)|^2 = \left(\frac{e^2E^2}{2m\omega^3\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \left(2\sin\frac{\omega\tau}{2}\right)^{2n} = \frac{1}{n!}\left[\frac{e^2E^2(1-\cos\omega\tau)}{m\omega^3\hbar}\right]^n. \tag{2.38}$$

Теория возмущений работает, если выражение в квадратных скобках много меньше единицы.

6 б. *(Первое решение.)* Запишем гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}$ через бозе-операторы:

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 = \hbar\omega\left(a^+a + 1/2\right), \qquad \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int} = -eE\widehat{x} = -eEl_0(a + a^+), \tag{2.39}$$

($l_0 = \sqrt{\hbar/2m\omega}$). Найдем $a(t)$ и $a^+(t)$ в случае, когда $\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int} = 0$:

$$\dot{a} = (i/\hbar)[\widehat{\mathcal{H}}_0,\, a] = i\omega[a^+a, a] = -i\omega a\,, \qquad \dot{a}^+ = i\omega a^+\,. \tag{2.40}$$

Отсюда имеем

$$a(t) = ae^{-i\omega t}\,, \qquad a^+(t) = a^+e^{i\omega t}\,. \tag{2.41}$$

Теперь пусть $\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int} \neq 0$. Запишем уравнения движения для a в представлении взаимодействия:

$$\dot{a} = (i/\hbar)[\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int},\, a] = ieEl_0e^{-i\omega t}\,. \tag{2.42}$$

Находим решение:

$$a(\tau) = a(0) - iEl_0\int_0^\tau e^{-i\omega t}dt = a(0) + \mu\,, \tag{2.43}$$

где $a(0)$ — канонический бозевский оператор уничтожения, а

$$\mu = \frac{eEl_0}{\hbar\omega}(e^{-i\omega\tau} - 1)\,. \tag{2.44}$$

Отсюда получаем зависимость n-го состояния от времени:

$$|n, t=\tau\rangle = \frac{(a^+(\tau))^n}{\sqrt{n!}}|0, t=\tau\rangle = \frac{(a^+(0)+\mu^*)^n}{\sqrt{n!}}|0, t=\tau\rangle\,. \tag{2.45}$$

Теперь разлагаем состояние $|0, t=0\rangle$ по состояниям $|n, t=\tau\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle n, t=\tau|0, t=0\rangle &= \langle 0, t=\tau|\frac{(a(0)+\mu)^n}{\sqrt{n!}}|0; t=0\rangle = \\ &= \frac{(\mu)^n}{\sqrt{n!}}\langle 0, t=\tau|0, t=0\rangle\,.\end{aligned} \tag{2.46}$$

Здесь мы воспользовались тем, что $a(0)|0\rangle = 0$.

Из (2.46) находим связь между вероятностями переходов:

$$W_{0\to n} = \frac{|\mu|^{2n}}{n!} W_{0\to 0}\,, \tag{2.47}$$

причем условие нормировки $\sum\limits_n W_{0\to n} = 1$ дает $W_{0\to 0} = e^{-|\mu|^2}$. Получается распределение Пуассона

$$W_{0\to n} = \frac{|\mu|^{2n}}{n!} e^{-|\mu|^2} \tag{2.48}$$

с параметром $|\mu|^2 = e^2E^2/m\hbar\omega^3\,(1-\cos\omega\tau)$. При малых μ ответ совпадает с результатом, полученным по теории возмущений, как и должно быть.

6 б. *(Второе решение.)* Приведем решение, показывающее связь задачи с *когерентными состояниями* осциллятора, определяемыми как собственные состояния оператора уничтожения a.

Исторически, когерентные состояния впервые появились в задаче о минимизации $\delta x \delta p$ для состояний осциллятора, рассмотренной Шредингером (1926). Позже оказалось, что они полезны и во многих других случаях. Специфическая координатно-временная структура когерентных состояний исследована в задаче 3 к § 23 [2].

Представим гамильтониан в виде

$$\widehat{\mathcal{H}} = \hbar\omega\left[a^+a + \tfrac{1}{2} + \lambda(a^+ + a)\right], \tag{2.49}$$

где $\lambda = -eEl_0/\hbar\omega$. Введем новые операторы

$$b = a + \lambda\,, \qquad b^+ = a^+ + \lambda\,. \tag{2.50}$$

Поскольку $[b, b^+] = 1$, переход от a и a^+ к b и b^+ определяет каноническое преобразование. При этом гамильтониан становится чисто осцилляторным:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \hbar\omega\left(b^+b + \tfrac{1}{2} - \lambda^2\right). \tag{2.51}$$

Введем собственные состояния оператора уничтожения b:

$$b|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle\,. \tag{2.52}$$

Здесь η может быть любым комплексным числом. Нетрудно проверить, что

$$|\eta\rangle = e^{-|\eta|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\eta^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\,, \tag{2.53}$$

где $|n\rangle$ — состояния гамильтониана (2.51), отвечающие энергии $E_n = \hbar\omega(n+1/2-\lambda^2)$. Возьмем состояние осциллятора до включения поля: $a|0_a\rangle = 0$. Используя связь a и b, находим

$$b|0_a\rangle = \lambda|0_a\rangle\,, \tag{2.54}$$

а значит,

$$|0_a\rangle = e^{-\lambda^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n_b\rangle\,. \tag{2.55}$$

Разложение по состояниям $|n_b\rangle$ позволяет сразу написать зависимость от времени:

$$|0_a\rangle(t) = \exp\Bigl(-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}t\Bigr)|0_a\rangle = e^{i(\lambda^2-1/2)\omega t}e^{-\lambda^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n_b\rangle, \tag{2.56}$$

т. е.

$$b|0_a\rangle(t) = \lambda e^{-i\omega t}|0_a\rangle(t)\,, \tag{2.57}$$

откуда

$$a|0_a\rangle(t) = \lambda(e^{-i\omega t}-1)|0_a\rangle(t)\,. \tag{2.58}$$

Обозначив $\mu = \lambda(e^{-i\omega t}-1)$, получаем

$$|0_a\rangle(t) = S(t)|0_a\rangle = e^{-|\mu|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\mu^n}{\sqrt{n!}}|n_a\rangle. \tag{2.59}$$

Отсюда находим столбец S-матрицы: $\langle n|\widehat{S}(t)|0\rangle = e^{-|\mu|^2/2}\mu^n/\sqrt{n!}$. Искомые вероятности переходов есть

$$W_{0\to n} = e^{-|\mu|^2}\frac{|\mu|^{2n}}{n!} = \frac{1}{n!}\Bigl[\frac{e^2E^2(1-\cos\omega t)}{m\omega^3\hbar}\Bigr]^n\exp\Bigl[-\frac{e^2E^2(1-\cos\omega t)}{m\omega^3\hbar}\Bigr] \tag{2.60}$$

Остальные матричные элементы можно получить из соотношений для зависящих от времени операторов: $\widehat{S}b^+ = b^+\widehat{S}e^{-i\omega t}$, $\widehat{S}a^+ = a^+\widehat{S}e^{-i\omega t}+\mu\widehat{S}$. Отсюда

$$\langle n|\widehat{S}|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{k}}\langle n|\widehat{S}a^+|k-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{k}}\langle n|a^+\widehat{S}e^{-i\omega t}+\mu\widehat{S}|k-1\rangle \tag{2.61}$$

и получается рекуррентная формула:

$$\langle n|\widehat{S}|k\rangle = \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{k}}e^{-i\omega t}\langle n-1|\widehat{S}|k-1\rangle - \frac{\mu}{k}\langle n|\widehat{S}|k-1\rangle\,. \tag{2.62}$$

Применяя (2.62) достаточно много раз, выражаем $\langle n|\widehat{S}|k\rangle$ через $\langle 0|\widehat{S}|0\rangle = e^{-|\mu|^2/2}$ и получаем общую формулу:

$$\langle n|\widehat{S}|m\rangle = \frac{e^{-|\mu|^2/2}}{\sqrt{m!n!}}\sum_{k=0}^{\min(m,n)}\frac{n!m!}{k!(n-k)!(m-k)!}\mu^{n+m-2k}e^{-i\omega kt}. \tag{2.63}$$

7. Используем причинную функцию Грина

$$G_{\alpha\beta} = -i\langle \mathrm{T}\,\psi_\alpha(\mathbf{r},t)\,\psi^+_\beta(\mathbf{r}',t')\rangle = \delta_{\alpha\beta}G\,, \tag{2.64}$$

введенную в (2.8). Плотность частиц с проекцией спина α есть

$$n_\alpha(\mathbf{r},t) = \lim_{t'\to t+0}\langle\psi^+_\alpha(\mathbf{r},t')\,\psi_\alpha(\mathbf{r},t)\rangle = -iG_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}'=\mathbf{r},t'=t+0) \tag{2.65}$$

(при $t' = t - 0$ из-за перестановки ψ и ψ^+ получилось бы $n_\alpha - 1$, по определению функции Грина). В нашем случае система однородна, и G зависит только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и $t - t'$. Поэтому переходим в фурье-представление:

$$\begin{aligned} n_\alpha &= -i \lim_{\tau\to -0} \int G(\varepsilon, \mathbf{p})\, e^{-i\varepsilon\tau}\, \tfrac{d^3\mathbf{p}\, d\varepsilon}{(2\pi)^4} = \\ &= -i \lim_{\tau\to -0} \int\limits_0^\infty \frac{4\pi p^2\, dp}{(2\pi)^3} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi}\, \frac{e^{-i\varepsilon\tau}}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta\,\mathrm{sign}(p - p_0)}\,, \end{aligned} \tag{2.66}$$

где $\tau = t - t'$, $\xi(p) = \mathbf{p}^2/2m - E_F$.

Контур интегрирования по ε замыкаем в верхней полуплоскости, поскольку $\tau < 0$. При этом при $p > p_0$ полюс не захвачен:

$$\int \frac{d\varepsilon}{2\pi}\, \frac{e^{-i\varepsilon\tau}}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta} = 0\,, \tag{2.67}$$

а при $p < p_0$ захвачен:

$$\int \frac{d\varepsilon}{2\pi}\, \frac{e^{-i\varepsilon\tau}}{\varepsilon - \xi(p) - i\delta} = ie^{-i\xi(p)\tau}\,. \tag{2.68}$$

Знак мнимой части $i\delta$ определяет, заполнено ли состояние с данным p. С учетом спиновой двойки

$$n = 2\int\limits_0^{p_0} \frac{4\pi p^2\, dp}{(2\pi)^3} \;=\; p_0^3/(3\pi^2)\,, \tag{2.69}$$

откуда находим $p_0^3 = 3\pi^2 n$.

8 а. Найдем

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = -i\int e^{i\varepsilon\tau} \langle \mathrm{T}\, \psi_\alpha(x)\psi^+_\beta(x')\rangle\, d\tau, \tag{2.70}$$

где $\tau = t - t'$. В импульсном представлении

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, p) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta\,\mathrm{sign}\,\varepsilon}\,, \qquad \xi(p) = \frac{p^2}{2m} - E_F\,. \tag{2.71}$$

Поэтому

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = \int e^{ip(x-x')} G_{\alpha\beta}(\varepsilon, p) \frac{dp}{2\pi} = -2m\delta_{\alpha\beta} \int \frac{e^{ip(x-x')}}{(p - p_1)(p - p_2)} \frac{dp}{2\pi}\,. \tag{2.72}$$

Полюсы подинтегрального выражения

$$p_{1,2} = \pm\varkappa\,, \tag{2.73}$$

где $\varkappa = \sqrt{2m(\varepsilon + E_F + i\delta\,\mathrm{sign}\,\varepsilon)}$. Если $\varepsilon > 0$, то p_1 лежит в верхней полуплоскости, а p_2 — в нижней, а если $\varepsilon < 0$, то наоборот.

При $x > x'$ замыкаем контур интегрирования сверху:

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = -2\pi i \delta_{\alpha\beta} \frac{2m}{2\pi} \frac{e^{i(x-x')p_+}}{2p_+} = -\delta_{\alpha\beta} \frac{im}{p_+} e^{ip_+(x-x')}\,, \tag{2.74}$$

где $p_+ = \varkappa \operatorname{sign} \varepsilon$ — тот из полюсов p_1, p_2, который находится в верхней полуплоскости. Повторять вычисление при $x < x'$ не нужно, поскольку $G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x', x)$. (Это следует из четности $G_{\alpha\beta}(\varepsilon, p)$ по p.) Окончательно имеем

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = -\frac{im}{p_+} e^{ip_+|x-x'|} \delta_{\alpha\beta}\,. \tag{2.75}$$

8 б. В присутствии стенки функцию Грина $G^{(1)}$ находим с помощью метода изображений:

$$G^{(1)}_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') - G_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, -x')\,, \tag{2.76}$$

где G дается (2.75). Обосновать такой ответ можно так же, как и при использовании метода изображений в электростатике. В самом деле, $G^{(1)}_{\alpha\beta}$ удовлетворяет уравнению

$$(\varepsilon - \widehat{\mathcal{H}}) G^{(1)}_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x') = \delta(x - x')\, \delta_{\alpha\beta} \tag{2.77}$$

и граничному условию $G^{(1)}_{\alpha\beta}(\varepsilon, 0, x') = 0$, а переход к изображениям обычным образом заменяет граничное условие условием антисимметрии.

8 в. Выразим плотность через функцию Грина, найденную в части б):

$$n(x) = -i \lim_{\tau \to -0} \operatorname{Tr} \int G^{(1)}_{\alpha\beta}(\varepsilon, x, x)\, e^{-i\varepsilon\tau} \frac{d\varepsilon}{2\pi}\,, \tag{2.78}$$

где Tr означает взятие следа. Суммируя по спинам, получаем

$$n(x) = -2i \lim_{\tau \to -0} \int \frac{e^{-i\varepsilon\tau}(1 - e^{-2ipx})}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta \operatorname{sign} \xi(p)} \frac{dp\, d\varepsilon}{(2\pi)^2}\,. \tag{2.79}$$

При интегрировании по ε, поскольку $\tau < 0$, замыкаем контур в верхней полуплоскости. Полюс захватывается при $\xi(p) < 0$, т. е. при $p^2/2m < E_F$. Находим

$$n(x) = -2i \int\limits_{p^2 < 2mE_F} (1 - e^{-2ipx}) \tfrac{2\pi i}{(2\pi)}^2\, dp\,. \tag{2.80}$$

Интегрируем по p:

$$\begin{aligned} n(x) &= 2 \int\limits_{-p_0}^{p_0} (1 - e^{-2ipx}) \tfrac{dp}{2\pi} = \frac{1}{\pi}\Big(2p_0 - \int\limits_{-p_0}^{p_0} e^{-2ipx} dp\Big) = \\ &= \frac{1}{\pi}\Big(2p_0 - \frac{\sin 2p_0 x}{x}\Big) = n_0 \Big(1 - \frac{\sin 2p_0 x}{2p_0 x}\Big)\,, \end{aligned} \tag{2.81}$$

где n_0 — плотность вдали от стенки. (Коэффициент в (2.81) можно проверить, подсчитав плотность частиц квазиклассически: $n_0 L = 2(2p_0 L)/2\pi\hbar$.) Плотность $n(x)$ обращается в нуль на стенке, а вдали осциллирует с периодом $\lambda_0 = \pi\hbar/p_0$ (рис. 2.1).

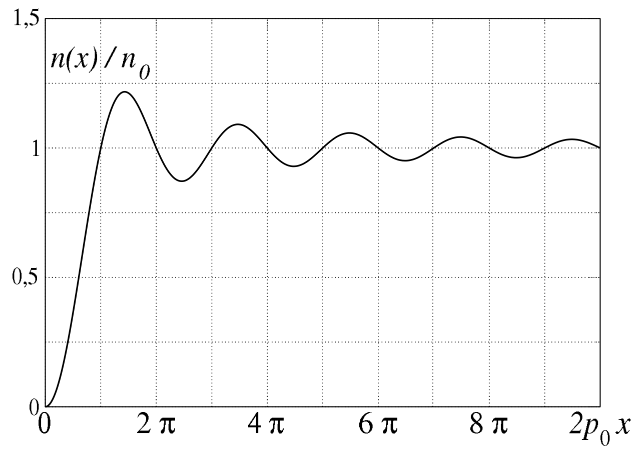


Рис. 2.1

Сравним среднее расстояние между электронами $d = n_0^{-1} = \pi\hbar/2p_0$ с периодом осцилляций λ_0 — они отличаются в два раза. Это отличие связано со спином электронов. Фермиевские корреляции, приводящие к осцилляциям, имеются только для электронов с одинаковой проекцией спина. Плотность таких электронов есть $n_0/2 = \lambda_0^{-1}$, что как раз соответствует периоду осцилляций.

9. Рассмотрим вероятность $p(t,\mathbf{x})$ блуждающей частицы оказаться в узле x на шаге t. Вероятности на шаге t и $t+1$ связаны простым соотношением:

$$p(t+1,\mathbf{x}) = \frac{1}{2n} \sum_{|\mathbf{x}'-\mathbf{x}|=1} p(t,\mathbf{x}') \qquad (2.82)$$

(сумма берется по $2n$ соседям узла $\mathbf{x}$). Перейдем к фурье-образу $p(t,\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{qx}}\, p(t,\mathbf{x})$. Соотношение (2.82) дает

$$p(t+1,\mathbf{q}) = W(\mathbf{q})\, p(t,\mathbf{q})\,, \qquad W(\mathbf{q}) = \frac{1}{n}(\cos q_1 + \ldots + \cos q_n)\,. \qquad (2.83)$$

Находим производящую функцию

$$G(z,\mathbf{q}) = \sum_{t\geqslant 0} z^t p(t,\mathbf{q}) = \frac{1}{1 - zW(\mathbf{q})}\,. \qquad (2.84)$$

Вероятности $p(t,\mathbf{x})$ выражаются через $G(z,\mathbf{q})$ так:

$$p(t,\mathbf{x}) = \frac{-i}{(2\pi)^{n+1}} \oint \frac{dz}{z^{t+1}} \int \frac{d^n q\; e^{i\mathbf{qx}}}{1 - zW(\mathbf{q})}\,, \qquad (2.85)$$

где интеграл по $d^n q$ берется по области $-\pi < q_i < \pi$ $(i = 1, \ldots, n)$, а интеграл по z — по любому контуру, охватывающему точку $z = 0$.

Теперь, чтобы найти вероятность блужданий без возврата в начало координат, немного модифицируем правила игры. Предположим, что частица блуждает случайно, как и раньше, но, как только она попадает в начало координат, ее «удаляют с поля». В этом случае связь между $p(t+1, \mathbf{x})$ и $p(t, \mathbf{x})$ будет такая:

$$p(t+1, \mathbf{x}) = \begin{cases} \dfrac{1}{2n} \sum\limits_{|\mathbf{x}'-\mathbf{x}|=1} p(t, \mathbf{x}') & \text{при} \quad x \neq 0, \\ 0 & \text{при} \quad x = 0. \end{cases} \tag{2.86}$$

Переходя к фурье-образу $p(t, \mathbf{q})$, получаем

$$p(t+1, \mathbf{q}) = W(\mathbf{q})\, p(t, \mathbf{q}) - \int W(\mathbf{k})\, p(t, \mathbf{k}) \frac{d^n k}{(2\pi)^n}\,. \tag{2.87}$$

Производящая функция $\tilde{G}(z, \mathbf{q}) = \sum\limits_{t \geqslant 0} z^t p(t, \mathbf{q})$ получается умножением (2.86) на z^{t+1} и суммированием по $t \geqslant 0$. Находим

$$\tilde{G}(z, \mathbf{q})\ (1 - zW(\mathbf{q})) = 1 - z \int W(\mathbf{k})\, \tilde{G}(z, \mathbf{k})\, \frac{d^n k}{(2\pi)^n} \tag{2.88}$$

Это уравнение можно записать в таком виде:

$$\tilde{G}(z, \mathbf{q}) = G(z, \mathbf{q}) + G(z, \mathbf{q}) \int \Sigma(z, \mathbf{k})\, \tilde{G}(z, \mathbf{k})\, \frac{d^n k}{(2\pi)^n}\,, \tag{2.89}$$

где $\Sigma(z, \mathbf{k}) = G^{-1}(z, \mathbf{k}) - 1$. (Заметим, что по форме уравнение (2.89) напоминает уравнение Дайсона (4.9).)

Ищем решение (2.89) в виде

$$\tilde{G}(z, \mathbf{q}) = \lambda(z)\, G(z, \mathbf{q})\,, \tag{2.90}$$

где $\lambda(z)$ — некоторая функция z. Подставляя (2.90) в (2.89), находим

$$\lambda(z) = 1 - \lambda(z) \int (G(z, \mathbf{q}) - 1)\, \frac{d^n q}{(2\pi)^n}\,, \tag{2.91}$$

откуда

$$\lambda^{-1}(z) = \int G(z, \mathbf{q})\, \frac{d^n q}{(2\pi)^n}\,. \tag{2.92}$$

Рассмотрим вероятность P_t того, что частица за t шагов ни разу не вернулась в начало координат. Производящая функция $F(z) = \sum\limits_{t \geqslant 0} z^t P_t$, очевидно, есть

$$F(z) = \tilde{G}(z, \mathbf{q} = 0) = \frac{\lambda(z)}{1 - z}\,. \tag{2.93}$$

Находим вероятность

$$P_t = \frac{1}{2\pi i} \oint\limits_{|z|=r} \frac{dz}{z^{t+1}} \frac{\lambda(z)}{1-z}\,, \tag{2.94}$$

где $\lambda(z)$ дается (2.92), а радиус контура интегрирования $r < 1$.

Для нахождения вероятности того, что частица никогда не вернется в начало координат, необходимо перейти в (2.94) к пределу $t \to \infty$. Это удобно сделать, рассмотрев

$$P_{a,t} = A_t(P_0 + aP_1 + \ldots + a^{t-1}P_{t-1}) = \frac{A_t}{2\pi i} \oint\limits_{|z|=r} \frac{(1-a^t z^{-t})\lambda(z)}{(1-z)(z-a)} dz\,, \tag{2.95}$$

где a — вспомогательный параметр, принимающий значения $0 < a < r$, а $A_t = (1 + a + ... + a^{t-1})^{-1} = (1-a)/(1-a^t)$. Переходя в (2.95) к пределу $t \to \infty$, получаем

$$P_a^* = \frac{1-a}{2\pi i} \oint\limits_{|z|=r} \frac{\lambda(z)\,dz}{(1-z)(z-a)}\,, \tag{2.96}$$

Рассмотрим контурный интеграл (2.96). Функция $\lambda(z)$ аналитична внутри единичного круга, поэтому внутри контура $|z| = r$ подинтегральное выражение в (2.96) имеет один простой полюс $z = a$. Вычет в точке $z = a$ есть $\lambda(a)$, и поэтому $P_a^* = \lambda(a)$. Искомая вероятность невозвращения, согласно (2.95), есть $\lim\limits_{a\to 1} P_a^*$. Следовательно,

$$P = \lambda(a)_{a\to 1} = \left[\int G(1,\mathbf{q})\, \frac{d^n q}{(2\pi)^n}\right]^{-1}. \tag{2.97}$$

При $n \leqslant 2$ интеграл в (2.97) расходится на малых q, поэтому вероятность невозвращения $P = 0$.

В другом пределе, при $n \to \infty$, величина суммы косинусов в $W(\mathbf{q})$ порядка $\sqrt{n}$, согласно закону больших чисел. (Это справедливо не для всех $\mathbf{q}$, а только для «типичных», но для оценки интеграла в (2.97) этого достаточно.) Заменяя в $G(1,\mathbf{q})$ величину $1 - W(\mathbf{q})$ на 1, находим, что при больших n вероятность невозвращения $P \to 1$.

10. Для того чтобы найти сопротивление сетки между двумя произвольными узлами, сначала рассмотрим более простую ситуацию. Допустим, что ток I втекает в узел $\mathbf{x} = 0$ и растекается на бесконечность. Найдем распределение потенциала $\varphi(\mathbf{x})$ на узлах. Условие сохранения тока (закон Кирхгофа) гласит:

$$\sum_{|\mathbf{x}'-\mathbf{x}|=1} (\varphi(\mathbf{x}) - \varphi(\mathbf{x}'))/R = \begin{cases} 0, & \mathbf{x} \neq 0, \\ I, & \mathbf{x} = 0, \end{cases} \tag{2.98}$$

где сумма, как и в задаче 9, берется по ближайшим соседям $\mathbf{x}'$ узла $\mathbf{x}$. Обратим внимание, что выражение (2.98), по существу, определяет функцию Грина оператора Лапласа на решетке.

При переходе к фурье-образу уравнение (2.98) принимает вид

$$\varphi(\mathbf{q})\ [2n - 2(\cos q_1 + \ldots + \cos q_n)]\,/R = I\,, \tag{2.99}$$

или, что то же самое,

$$\varphi(\mathbf{q}) \ = \frac{IR}{2n}\,G(1,\mathbf{q})\,. \tag{2.100}$$

То, что функция Грина уравнения Лапласа оказалась связана со случайными блужданиями, совершенно не удивительно, поскольку распределение вероятности для блужданий подчиняется уравнению диффузии, записывающемуся через n–мерный оператор Лапласа (в данном случае решеточный).

Теперь рассмотрим более сложное распределение токов и потенциалов, которое возникает, когда ток I втекает в узел 0, и такой же ток вытекает через узел $\mathbf{a}$. Потенциал в этом случае можно выразить через $\varphi(\mathbf{x})$, пользуясь линейностью закона Кирхгофа (т. е. принципом суперпозиции). Находим

$$\varphi'(\mathbf{x}) \ = \varphi(\mathbf{x}) - \varphi(\mathbf{x}-\mathbf{a})\,. \tag{2.101}$$

Для определения сопротивления между узлами 0 и a найдем разность потенциалов между этими узлами:

$$\Delta\varphi = \varphi'(0) - \varphi'(\mathbf{a}) = 2\varphi(0) - \varphi(\mathbf{a}) - \varphi(-\mathbf{a})\,. \tag{2.102}$$

Искомое сопротивление есть $\Delta\varphi/I$. С помощью обратного преобразования Фурье выражаем $\varphi(0)$ и $\varphi(\pm a)$ через фурье-образ (2.100), и получаем

$$R_{\mathbf{a}} = \frac{R}{n}\int (1 - e^{i\mathbf{qa}})\,G(1,\mathbf{q})\,\frac{d^nq}{(2\pi)^n}\,, \tag{2.103}$$

где интеграл, как и в задаче 9, берется по зоне Бриллюэна $-\pi < q_i \leqslant \pi$, $i = 1, ..., n$.

Методом задачи 9 можно показать, что сопротивление между узлами решетки имеет простую вероятностную интерпретацию. А именно, $R_{\mathbf{a}}$ есть $\frac{1}{n}R$, деленное на вероятность того, что при случайном блуждании, начинающемся в точке 0, частица попадает в точку $\mathbf{a}$ до того, как возвращается в точку 0.

Рассмотрим сопротивление между двумя удаленными точками. В интеграле (2.103) при $|a| \gg 1$ вклад быстро осциллирующей экспоненты $e^{i\mathbf{qa}}$ мал. Пренебрегая им, получаем такое же выражение, как для вероятности (2.97) в задаче 9, и находим соотношение между $R_{a\to\infty}$ и P:

$$R_{a\to\infty} = \frac{R}{nP} \qquad (n > 2)\,. \tag{2.104}$$

Этот результат справедлив только при $n > 2$, поскольку при $n \leqslant 2$ вероятность P обращается в нуль (интеграл в (2.97) расходится). Обратим внимание, что в этой задаче «критическая размерность» $n_{\text{c}} = 2$ оказывается такой же, как в задаче 9 о случайных блужданиях. Это не случайно, поскольку, как уже отмечалось, и в том и в другом случае речь идет о функции Грина n–мерного уравнения Лапласа.

При $n=2$ интеграл (2.103) для $R_{a\gg 1}$ определяется малыми q. Разлагая $\cos q_i = 1 - q_i^2/2 + \ldots$, находим с логарифмической точностью

$$R_{a\gg 1} = \frac{R}{2\pi}\ln|a| \qquad (n=2)\,. \tag{2.105}$$

К такому же ответу приводит рассмотрение в приближении непрерывной среды, справедливом при $|a|\gg 1$, в котором (2.105) есть просто решение двумерного уравнения Лапласа.

Для двумерной сетки интересно найти сопротивления между близкими узлами. Это нетрудно сделать, вычисляя интеграл (2.103). Так, например,

$$R_{mm} = \frac{R}{2}\int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi}\frac{1-e^{im(\theta_1+\theta_2)}}{1-\frac{1}{2}(\cos\theta_1+\cos\theta_2)}\frac{d\theta_1 d\theta_2}{(2\pi)^2} = \frac{R}{2\pi}\int\limits_{0}^{\pi}\frac{1-e^{2im\theta_+}}{\sin\theta_+}d\theta_+ = \tag{2.106}$$

$$= \frac{R}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{u^{2m}-1}{u^2-1}du = \frac{2}{\pi}R\left(1+\frac{1}{3}+\ldots+\frac{1}{2m-1}\right)\,. \tag{2.107}$$

При вычислении интеграла (2.106) была сделана замена переменных $\theta_\pm = \frac{1}{2}(\theta_1 \pm \theta_2)$ и использован известный интеграл $\int\limits_0^{2\pi}(a+b\cos w)^{-1}dw = 2\pi(a^2-b^2)^{-1/2}$.

Приведем также ответы и для некоторых других узлов[3]:

$$\begin{aligned} &R_{10} = (1/2)\,R\,, \quad R_{11} = (2/\pi)\,R\,, \quad R_{20} = (2-4/\pi)\ R\,, \\ &R_{21} = (4/\pi - 1/2)\ R\,, \quad R_{30} = (17/2 - 24/\pi)\ R\,. \end{aligned} \tag{2.108}$$

Обратим внимание на то, что все приведенные в (2.108) значения сопротивления равны $a + b/\pi$, где a и b — рациональные числа. Нетрудно показать, что это верно и для других узлов двумерной решетки.

[3]Ответ для R_{10} может быть также получен элементарным способом, с помощью принципа суперпозиции.

Глава 3.

Квантовая механика одной частицы

3.1. Теория возмущений и функция Грина

В этой главе мы рассмотрим задачи одночастичной нерелятивистской квантовой механики, решаемые методом теории возмущений. Наша цель — продемонстрировать связь квантовомеханической теории возмущений с функциями Грина и диаграммной техникой.

Динамика нерелятивистской частицы во внешнем поле описывается с помощью волновой функции, удовлетворяющей уравнению Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)\,. \tag{3.1}$$

В квантовой механике рассматривают два основных типа задач: отыскание спектра энергий системы и вычисление вероятностей переходов, вызванных рассеянием или зависящим от времени внешним полем.

Решение первой задачи требует отыскания собственных значений энергии для стационарного уравнения Шредингера:

$$\varepsilon\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r})\,. \tag{3.2}$$

Дискретный спектр соответствует связанным состояниям, а непрерывный — свободным. В задачах второго типа (для определенности будем говорить о рассеянии) требуется найти решение уравнения (3.2), описывающее падающую и рассеянную волны, и определить амплитуду рассеяния в данное конечное состояние.

Напомним, что процессу рассеяния плоской волны $e^{i\mathbf{kr}}$ на потенциале $V(\mathbf{r})$ отвечает волновая функция

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}} + \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \tag{3.3}$$

причем $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ имеет асимптотически вид расходящейся сферической волны:

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{k},\, k\mathbf{n})\,(e^{ik|\mathbf{r}|}/|\mathbf{r}|)\,, \qquad |\mathbf{r}| \to \infty\,, \tag{3.4}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$. Функция $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ называется *амплитудой рассеяния.*

Существует несколько методов решения задачи о рассеянии (и других подобных ей задач). Мы воспользуемся методом теории возмущений, поскольку в нем связь с диаграммной техникой проявляется лучше всего. Запишем волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$, являющуюся решением (3.2), в виде ряда по степеням потенциала $V(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \psi^{(1)}(\mathbf{r}) + \psi^{(2)}(\mathbf{r}) + \dots\,. \tag{3.5}$$

Нетрудно убедиться, что члены ряда (3.5) удовлетворяют уравнениям:

$$\begin{aligned}
&\left(\varepsilon + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = 0\ ;\\
&\left(\varepsilon + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\psi^{(0)}(\mathbf{r})\ ;\\
&\left(\varepsilon + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi^{(2)}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\psi^{(1)}(\mathbf{r})\ ;\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Решение свободного уравнения Шредингера обычно берется в виде плоской волны, $\psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{kr})$. Если потенциал $V(\mathbf{r})$ слабый, достаточно ограничиться несколькими первыми членами ряда (3.5). Скажем, амплитуда рассеяния в борновском приближении определяется функцией $\psi^{(1)}(\mathbf{r})$.

С формальной точки зрения, ряд (3.5) можно рассматривать даже в случае сильного потенциала, если выполнить аналитическое продолжение по ε из области больших энергий $|\varepsilon| \gg |V(\mathbf{r})|$, в которой ряд (3.5) сходится. Вообще говоря, таким способом можно найти амплитуду рассеяния при произвольной энергии, даже если потенциал не мал. Отметим, что обычно оказывается более удобным не выписывать члены ряда по-отдельности, а перейти от (3.5) к интегральному уравнению на амплитуду рассеяния (см. задачу 11, а также [2], гл. XVII, § 130).

Чтобы установить связь с диаграммной техникой, рассмотрим функцию Грина уравнения Шредингера:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V(\mathbf{r})\right)G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \delta(t - t')\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\,. \tag{3.7}$$

При $V(\mathbf{r}) = 0$ движение свободное:

$$G_0(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}') = \iint G_0(\varepsilon, \mathbf{p})\,e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - i\varepsilon(t-t')}\,\frac{d\varepsilon}{2\pi}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,, \tag{3.8}$$

$$G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{p}^2/2m + i\delta}\,. \tag{3.9}$$

Знак мнимой части $+i\delta$ выбран так, чтобы функция $G_0(\varepsilon, \mathbf{p})$ была регулярна в верхней полуплоскости комплексной ε. Это условие обеспечивает соблюдение причинности: $G_0(t - t') = 0$ при $t < t'$.

В общем случае функцию Грина можно записать как оператор:

$$\widehat{G} = \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \widehat{\mathbf{p}}^2/2m - V(\mathbf{r})\right)^{-1} = (\widehat{G}_0^{-1} - \widehat{V})^{-1} = (1 - \widehat{V}\widehat{G}_0)^{-1}\widehat{G}_0 \,. \qquad (3.10)$$

При малом V выражение (3.10) можно разложить в ряд:

$$\widehat{G} = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0 + \ldots \,, \qquad (3.11)$$

причем произведения $\widehat{G}_0$ и $\widehat{V}$ следует понимать в операторном смысле (как свертку).

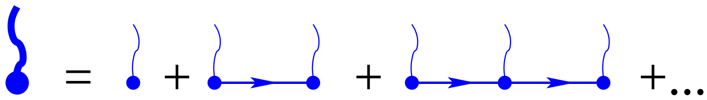
Для нас существенно, что между рядом (3.11) для функции Грина и рядом теории возмущений (3.5) имеется почленное взаимнооднозначное соответствие. Пользуясь этим соответствием, можно связать амплитуду рассеяния с функцией Грина (3.7). При этом оказывается, что интегральное уравнение Дайсона для собственно-энергетической части гриновской функции, с помощью которого обычно суммируют ряды типа (3.11), в точности соответствует интегральному уравнению для амплитуды рассеяния (см. задачу 11, а также гл. 4).

Функцию Грина можно использовать также и для отыскания спектра квантово-механической системы. Известно, что амплитуда рассеяния, как функция энергии ε, имеет полюсы во всех точках дискретного спектра[1]. Таким же свойством обладает и функция Грина (3.7), непосредственно связанная с амплитудой рассеяния. Поэтому функции Грина могут с одинаковым успехом применяться как в задачах, касающихся связанных состояний, так и в задачах о рассеянии. Примеры такого рода приведены в задачах 12 и 13.

Литература: Метод решения уравнения Шредингера, использующий потенциальную энергию в качестве возмущения, изложен в [2], § 45. Определение квантово-механической амплитуды рассеяния, а также доказательство теоремы унитарности и других полезных свойств можно найти в [2], § 123–126, 133. Интегральное уравнение для амплитуды рассеяния в импульсном представлении выведено в [2], § 130.

3.2. Задачи 11 – 15

Задача 11. (*Диаграммный ряд и интегральное уравнение для амплитуды рассеяния.*) Покажите, что рассеяние частицы в статическом внешнем поле $V(\mathbf{r})$ описывается суммой графиков, показанных на рис. 3.1. Какие выражения сопоставляются графическим элементам? (Используйте импульсное представление.)



[1] см. [2], гл. XVII, § 128, 129

Рис. 3.1

Свяжите диаграммы на рис. 3.1 с амплитудой рассеяния $f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$, определенной в (3.3),(3.4). Получите соотношение

$$f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)\,, \tag{3.12}$$

где $F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ удовлетворяет уравнению

$$F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) + \int \frac{V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q})\, F(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})}{\varepsilon - \hbar^2\mathbf{q}^2/2m + i\delta}\, \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,, \tag{3.13}$$

$\varepsilon = \hbar^2\mathbf{k}_1^2/(2m) = \hbar^2\mathbf{k}_2^2/(2m)$.

Определенную так амплитуду $F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ называют *амплитудой рассеяния в энергетической нормировке.* Пользоваться ею часто бывает удобнее, чем обычной амплитудой рассеяния. Именно такая амплитуда рассеяния естественно возникает в диаграммной технике (см. другие задачи этой главы, а также задачи глав 9 – 11). По сравнению с обычной квантовомеханической амплитудой рассеяния $f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$, она менее произвольна, поскольку никак не зависит от выбора нормировки плоских волн.

Задача 12. (*Слабо связанное состояние в мелкой яме.*) Мелкой называется потенциальная яма, глубина которой $U_0 \ll \hbar^2/2ma^2$, где a — радиус ямы. Размер связанного состояния в такой яме много больше ее радиуса, а энергия связи — много меньше глубины ямы U_0. Рассмотрим мелкую яму в пространстве произвольной размерности D, и выясним, в каких случаях в ней может образоваться связанное состояние.

Решите эту задачу, используя связь амплитуды рассеяния (3.13) со связанными состояниями: энергия каждого связанного состояния соответствует полюсу амплитуды $F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ как функции энергии ε. Покажите, что связанное состояние в мелкой яме существует только при $D\leqslant 2$.

Воспользуйтесь тем, что в пространстве размерности D амплитуда $F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ удовлетворяет уравнению, получающемуся из (3.13) заменой $d^3q/(2\pi)^3 \to d^Dq/(2\pi)^D$. В уравнении (3.13) замените потенциал ямы на δ-функцию — при этом все интегрирования по импульсам станут независимыми. Сравните результаты, получающиеся при $D = 1, 2$, с известными квантовомеханическим выражениями (см. задачи в [2], § 45).

Задача 13. (*Двумерное рассеяние: логарифм и ренормгруппа.*) Рассмотрим подробнее рассеяние в размерности два на короткодействующем потенциале. Это может быть яма, причем не обязательно мелкая, или потенциал положительного знака. Определим зависимость амплитуды рассеяния F от энергии в низкоэнергетической области.

Нас интересует область энергий много меньших $\varepsilon_a = \hbar^2/2ma^2$, где a — радиус ямы. Ясно, что зависимость от энергии ε возникает, как и в задаче 12, от интегрирования по $|q| \ll a^{-1}$. Для правильного описания низкоэнергетической физики, как и при отыскании связанного состояния (задача 12), кажется достаточным заменить потенциал на δ-функцию. При этом интегралы по q начинают логарифмически расходиться при $q \to \infty$, и их придется «обрезать руками» при $q \approx a^{-1}$. Такой «ремесленный» подход, хотя и приводит к качественно правильному ответу, является слишком грубым, т. к. полностью игнорирует, например, глубокие уровни в потенциале, если таковые есть.

Более рафинированный метод заключается в следующем. Вычислим производную $\partial F(\varepsilon)/\partial\varepsilon$. Дифференцируя диаграммы рис. 3.1 по ε и собирая члены, получим уравнение [2]

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(\varepsilon) = \frac{m}{2\pi\hbar^2\varepsilon}F^2(\varepsilon)\,, \tag{3.14}$$

справедливое при $|\varepsilon| \ll \varepsilon_a$. Решив это уравнение, можно связать обрезку логарифма и амплитуду F при большой энергии.

Задача 14. (*Поляризуемость связанного состояния.*) Заряженная частица находится в мелкой двумерной яме в основном состоянии. Определим поляризуемость системы в слабом внешнем поле [3].

а‘ Используя результат задачи 13, запишите функцию Грина в импульсном представлении. Сформулируйте правило обхода полюсов, выражающее, что связанное состояние занято, а состояния непрерывного спектра свободны.

б) Выразите дипольный момент системы через точную функцию Грина в импульсном представлении (см. [1], с. 75 и далее).

в) Рассмотрите поправку к функции Грина, линейную по электрическому полю. Нарисуйте графики, определяющие поляризуемость. Какие из них обращаются в нуль при интегрировании по энергии или импульсам?

Задача 15. (*Теорема унитарности для амплитуды рассеяния.*) Амплитуда рассеяния $f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ частицы во внешнем поле удовлетворяет теореме унитарности:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') - f^*(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = \frac{ik}{2\pi}\int f(\mathbf{k},\mathbf{k}'')\, f^*(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\, do''\,, \tag{3.15}$$

где do'' — элемент интегрирования по направлениям $\mathbf{k}''$ (см. [2], § 125). Мы видели, что $F(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -(2\pi\hbar^2/m)\ f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ дается простой суммой графиков (задача 11). Поэтому полезно нучиться получать (3.15) на графическом языке. Как это сделать? Рассмотрите диаграммы, изображенные на рис. 3.2, где

$$G^{R(A)}(\varepsilon,\mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{p}^2/2m \pm i\delta} \tag{3.16}$$

— запаздывающая и опережающая функции Грина. Получите левую и правую части

[2]Уравнение такого типа называется в теории поля и статистической физике уравнением ренормгруппы.

[3]Задачи 11 – 13 можно решить и без диаграмм. А задачу 14? Попытайтесь…

(3.15), просуммировав эти графики двумя разными способами.

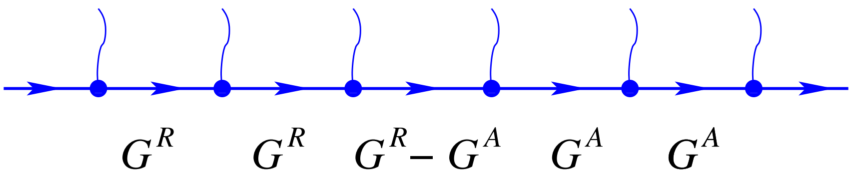


Рис. 3.2

Аналогично получите соотношение унитарности в двумерном случае. Какова связь двумерной амплитуды рассеяния $f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ с $F(\mathbf{k},\mathbf{k}')$? Убедитесь, что амплитуда F, найденная в задаче 13, обладает свойством унитарности.

Эта задача весьма важна для дальнейшего, поскольку в ней на простейшем примере показан прием, обобщающийся на более сложные случаи. Для любого процесса рассеяния, распада, перехода и т. д. имеется связь между его вероятностью и мнимой частью амплитуды. Эта связь описывается *теоремой унитарности*. В графическом представлении, мнимая часть какой-либо амплитуды может быть найдена путем разбиения соответствующих диаграмм каким–либо сечением, и заменой функций Грина по одну сторону сечения на комплексно-сопряженные функции. При этом следует просуммировать по всем возможным способам выбора сечения диаграммы. Состояния в сечении имеют смысл конечных состояний распада, рассеяния, и т. п.

3.3. Решения задач 11 – 15

11. Мы будем обращаться с функцией Грина несколько более вольно, чем это принято в учебниках по квантовой механике. Перед тем, как читать решение, полезно вспомнить стандартный вывод интегрального уравнения для амплитуды рассеяния, использующий уравнение Шредингера в импульсном представлении (см. [2], § 130).

Чтобы найти состояние рассеяния (3.3),(3.4), запишем уравнение Шредингера для движения в потенциале $V(\mathbf{r})$ через функцию Грина:

$$\widehat{G}^{-1}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{или} \quad (\widehat{G}_0^{-1} - \widehat{V})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0\,. \tag{3.17}$$

Будем искать решение в виде (3.3). На массовой поверхности, при $\varepsilon = k^2/2m$, получаем уравнение для $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$(\widehat{G}_0^{-1} - \widehat{V})\ \chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = V|\mathbf{k}\rangle\,. \tag{3.18}$$

Записываем решение через функцию Грина, $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\widehat{G}\widehat{V}|\mathbf{k}\rangle$, и разлагаем $\widehat{G}$ в ряд по $\widehat{V}$:

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\widehat{G}_0\widehat{V} + \widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \ldots|\mathbf{k}\rangle\,. \tag{3.19}$$

Удобно переписать это выражение, введя оператор

$$\widehat{F} = \widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \ldots \tag{3.20}$$

Имеем

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}|\widehat{G}_0\widehat{F}|\mathbf{k}\rangle\,. \tag{3.21}$$

Смысл этой записи в том, что $\widehat{F}$ описывает многократное рассеяние падающей волны на потенциале $V(\mathbf{r})$, а $\widehat{G}_0$ — свободное движение после последнего рассеяния.

В координатном представлении G_0 имеет вид:

$$G_0(\varepsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\varepsilon - \mathbf{p}^2/2m + i\delta}\,\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\varkappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,, \tag{3.22}$$

где $\hbar\varkappa = \sqrt{2m\varepsilon}$. На массовой поверхности $\varkappa = k$.

Слагаемое $i\delta$ в знаменателе (3.22) введено для того, чтобы выбрать запаздывающее решение. С тем же успехом можно было бы выбрать знак $-i\delta$, что привело бы к ряду для $f^*(\mathbf{k}', \mathbf{k})$. Комплексно-сопряженная амплитуда соответствует опережающему решению задачи о рассеянии.

Нас интересует асимптотика $\chi(\mathbf{r})$, поэтому запишем $\mathbf{r} = R\mathbf{n}$ и будем считать R большим. Тогда $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = R - |\mathbf{r}'|\cos\theta + O(1/R)$, где θ — угол между $\mathbf{n}$ и $\mathbf{r}'$ (рис. 3.3).

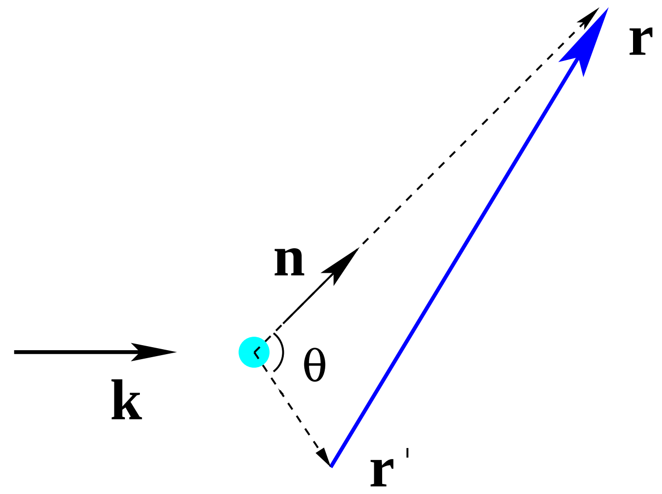


Рис. 3.3

Подставляем G_0 в виде (3.22) в выражение (3.21) и разлагаем $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$:

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\varkappa R}}{R}\int e^{-i\varkappa|\mathbf{r}'|\cos\theta}\langle\mathbf{r}'|F|\mathbf{k}\rangle d^3r'\,. \tag{3.23}$$

Сравнивая этот ответ с определением амплитуды рассеяния, получаем требуемое соотношение:

$$f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\mathbf{k}_2|\widehat{F}|\mathbf{k}_1\rangle\,, \tag{3.24}$$

где $\mathbf{k}_2 = |k_1|\mathbf{n}$.

Перейдем к выводу интегрального уравнения. Ряд для $\widehat{F}$ может быть представлен графически, как показано на рис. 3.1. Запишем сумму

$$F \;=\; \widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \ldots \tag{3.25}$$

в импульсном представлении: $F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = F^{(1)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + F^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + \ldots$,

$$\begin{aligned}
&F^{(1)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\,, \\
&F^{(2)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \int \frac{V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q})\,V(\mathbf{q} - \mathbf{k}_1)\,(d^3q)}{\varepsilon - \mathbf{q}^2/(2m) + i\delta}\,, \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
&F^{(n)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \int\ldots\int \frac{V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}_{n-1})\ldots V(\mathbf{q}_1 - \mathbf{k}_1)\,(d^3q_{n-1})\,\ldots\,(d^3q_1)}{\bigl(\varepsilon - \mathbf{q}_{n-1}^2/(2m) + i\delta\bigr)\ldots\bigl(\varepsilon - \mathbf{q}_1^2/(2m) + i\delta\bigr)}\,, \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned} \tag{3.26}$$

где $(d^3q_i) = d^3q_i/(2\pi)^3$, $\varepsilon = \hbar^2\mathbf{k}_1^2/(2m)$.

Связь этих выражений с рядом на рис. 3.1 очевидна: волнистым линиям соответствуют матричные элементы потенциала, прямым линиям — функции Грина. По всем внутренним импульсам надо проинтегрировать, а входящий и выходящий импульсы взять на массовой поверхности.

Получаем интегральное уравнение для $\widehat{F}$:

$$\begin{aligned}
&\widehat{F} = \widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \ldots = \\
&= \widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0(\widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{V} + \ldots) = \widehat{V} + \widehat{V}\widehat{G}_0\widehat{F}
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Графически это можно изобразить как показано на рис. 3.4.

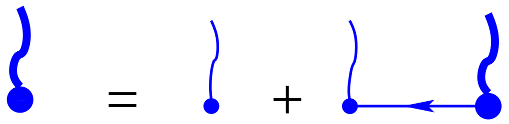


Рис. 3.4

В импульсном представлении интегральное уравнение принимает вид

$$F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) + \frac{2m}{\hbar^2}\int \frac{V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q})F(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})}{k_1^2 - q^2 + i\delta}\,\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,. \tag{3.28}$$

Решая это уравнение последовательными приближениями, вновь получаем ряд для $\widehat{F}$.

12. Полюсы функции Грина $\widehat{G}(\varepsilon)$ дают спектр системы. При этом, поскольку $\widehat{G}$ и $\widehat{F}$ связаны соотношением $\widehat{G} = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{F}\widehat{G}_0$, каждому связанному состоянию отвечает полюс $\widehat{F}(\varepsilon)$.

Начнем со случая $D = 1$. Рассмотрим одномерную яму глубины U_0 и ширины a. Заменяя потенциал на δ-функцию $V(x) = -U_0 a\,\delta(x)$, получаем фурье-компоненту $V(q) = -U_0 a = \text{const}$. При этом уравнение для $F(k, k')$ принимает вид

$$F(k, k') = -U_0 a + U_0 a \int \frac{F(k, q)}{\varepsilon - q^2/2m + i\delta}\,\frac{dq}{2\pi}\,. \tag{3.29}$$

Из (3.29) видно, что $F(k,k')$ не зависит от k'. Поэтому

$$F(k) = -U_0 a - \frac{U_0 a}{2\pi} F(k) \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{2m\, dq}{q^2 - k^2 - i\delta}\,, \tag{3.30}$$

что дает $F^{-1} + (U_0 a)^{-1} = -im/k = -i\sqrt{m/2\varepsilon}$, где $\varepsilon = k^2/(2m)$. Получаем

$$F(\varepsilon) = -\frac{U_0 a\sqrt{2(\varepsilon + i\delta)/m}}{\sqrt{2(\varepsilon + i\delta)/m} + iU_0 a}\,. \tag{3.31}$$

Амплитуда рассеяния $F(\varepsilon)$ имеет полюс при $\varepsilon_0 = -mU_0^2 a^2/(2\hbar^2)$, что совпадает с известным ответом для одномерной δ-ямы.

Пусть теперь $D = 2$. Снова считаем фурье-компоненту потенциала независящей от k: $V(k) = -U_0 a^2$. Уравнение для F имеет вид

$$F(\varepsilon) = -U_0 a^2 + U_0 a^2 \frac{2m}{\hbar^2} \int F(\varepsilon)\; \frac{2\pi q}{q^2 - k^2 - i\delta}\, \frac{dq}{(2\pi)^2}\,, \tag{3.32}$$

где F снова есть функция только ε. Интеграл

$$\int\limits_0^\infty \frac{dq^2}{q^2 - k^2 - i\delta} \tag{3.33}$$

логарифмически расходится на верхнем пределе. Но это не страшно: при $q \geqslant a^{-1}$ фурье-компонента $V(k)$ начинает быстро осциллировать, и интеграл с $V(k)$ сходится. Следовательно, можно пользоваться выражением (3.33), обрезав его «вручную» при $q \approx a^{-1}$:

$$\int\limits_0^{a^{-2}} \frac{dq^2}{q^2 - k^2 - i\delta} = \pi i + \ln \frac{1}{a^2(k^2 + i\delta)}\,. \tag{3.34}$$

Итак,

$$\begin{aligned} F(\varepsilon) &\approx -\frac{U_0 a^2}{1 + (2ma^2 U_0/4\pi\hbar^2)\ln(-k^2 a^2)} = \\ &= -\frac{U_0 a^2}{1 + (mU_0 a^2/2\pi\hbar^2)\ln(-\varepsilon m a^2/\hbar^2)}\,. \end{aligned} \tag{3.35}$$

Дискретный уровень

$$\varepsilon_0 \approx -\frac{\hbar^2}{ma^2} \exp\left(-\frac{2\pi\hbar^2}{ma^2 U_0}\right)\,. \tag{3.36}$$

Обратим внимание, что из-за неизвестного множителя порядка единицы, появившегося при обрезании в аргументе логарифма, уровень ε_0 дается выражением (3.36) только по порядку величины.

В размерности $D > 2$ интеграл

$$\int_0^{a^{-1}} \frac{q^{D-1}dq}{q^2 - k^2 - i\delta} \tag{3.37}$$

остается конечным при $k \to 0$. Поэтому для слабого потенциала $F(\varepsilon)$ не имеет полюсов при $|k| \ll a^{-1}$, что означает отсутствие связанного состояния.

13. Производную $\partial F/\partial\varepsilon$ можно связать с F в общем виде, так, что получится выражение, справедливое при произвольном потенциале. Для этого надо продифференцировать ряд на рис. 3.1 почленно (рис. 3.5).

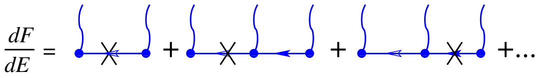


Рис. 3.5

Линия с крестиком обозначает функцию Грина, продифференцированную по энергии:

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon}G_0 = -\frac{1}{(\varepsilon - p^2/2m + i\delta)^2} = -G_0^2\,. \tag{3.38}$$

Группируя члены графического ряда и пользуясь графическим представлением амплитуды F (см. рисунки 3.1, 3.4), находим соотношение для производной $\partial F/\partial\varepsilon$ (рис. 3.6).

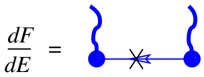


Рис. 3.6

Отсюда получаем:

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon}F_\varepsilon(k_1, k_2) = -\int \frac{F_\varepsilon(k_1, q)F_\varepsilon(q, k_2)}{(\varepsilon - q^2/2m + i\delta)^2}\,\frac{d^2q}{(2\pi)^2}\,. \tag{3.39}$$

Еще раз обратим внимание на то, что (3.39) — точный результат, а не приближенный.

Чтобы применить соотношение (3.39) в низкоэнергетической области, заметим, что зависимость $F_\varepsilon(k_1, k_2)$ от k_1 и k_2 имеет характерный масштаб $k_{1,2} \approx a^{-1}$. Поэтому при малых энергиях $|\varepsilon| \ll \varepsilon_a = \hbar^2/(ma^2)$ интеграл по q в (3.39) сходится в области, где зависимость F от q несущественна. Вычисляя интеграл, получаем

$$\frac{\partial}{\partial\varepsilon}F = -\frac{m}{2\pi\hbar^2\varepsilon}F^2\,. \tag{3.40}$$

Решение этого уравнения есть:

$$F(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar^2}{m\ln((\varepsilon + i\delta)/\varepsilon_0)}\,, \tag{3.41}$$

где ε_0 — неизвестная константа. Точка ветвления логарифма при $\varepsilon = 0$ смещена в нижнюю полуплоскость, поскольку вместо ε стоит $\varepsilon + i\delta$. Константа ε_0 вещественна и отрицательна, поскольку при $\varepsilon < 0$ амплитуда F вещественна. (Чтобы в этом убедиться, можно записать члены ряда для F, показанные на рис. 3.1, в координатном представлении, где функция Грина имеет вид $G_\varepsilon(r) = -(m/2\pi r)\exp(-\varkappa r)$, $\varkappa^2 = 2m\varepsilon$. Это выражение вещественно при $\varepsilon < 0$.)

Если ε_0 находится в низкоэнергетической области, $|\varepsilon_0| \leqslant \varepsilon_a$, то полюс при $\varepsilon = \varepsilon_0$ имеет реальный смысл, и ему соответствует дискретный уровень. В противном случае полюс находится вне области энергий, где применимо сделанное приближение, и поэтому смысла не имеет. Такая ситуация возникает, например, для рассеяния на слабом отталкивающем потенциале, когда ε_0 дается выражением (3.36) с отрицательным U_0.

Решение 14 а. Согласно задаче 11 функция Грина есть $G = G_0 + G_0 F G_0$, где амплитуда F найдена в задаче 13. В импульсном представлении

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = (2\pi)^2 \frac{\delta^{(2)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')}{\varepsilon - p^2/(2m) + i\delta} + \frac{F(\varepsilon)}{[\varepsilon - p^2/(2m) + i\delta][\varepsilon - p'^2/(2m) + i\delta]}\,. \qquad (3.42)$$

Положительный знак мнимой части $i\delta$ означает, что состояния непрерывного спектра пусты. При интегрировании по ε эти полюсы надо обходить сверху. Осталось выбрать обход полюса в $F(\varepsilon)$ при $\varepsilon = \varepsilon_0$. Это состояние заполнено, поэтому сдвигаем полюс вверх: $\varepsilon_0 \to \varepsilon_0 + i\delta$. Получаем $F(\varepsilon) = 2\pi\hbar^2/(m\ln(\varepsilon/\varepsilon_0))$, причем обход полюса $\varepsilon = \varepsilon_0$ и точки ветвления $\varepsilon = 0$ такой, как показано на рис. 3.7.

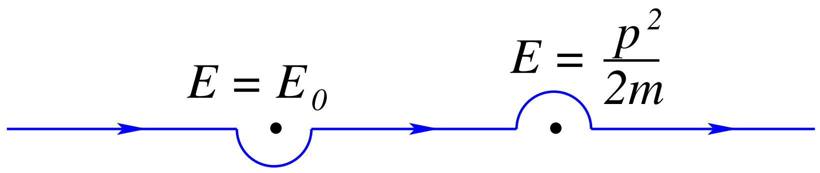


Рис. 3.7

14 б. Выражаем дипольный момент через функцию Грина:

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= e\int \mathbf{r}\, n(\mathbf{r})\, d^2r = -ie\int \lim_{t\to -0} \mathbf{r}\, G(t, \mathbf{r}, \mathbf{r})\, d^2r = \\ &= e\iint\left(\int \mathbf{r}\, e^{i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\mathbf{r}}\, d^2r\right)\cdot\left(\lim_{t\to -0}\int e^{-i\omega t}\, G(\omega, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)\frac{d\omega}{2\pi i}\right)\frac{d^2p_1 d^2p_2}{(2\pi)^4} = \\ &= -ie\iint \nabla_1 \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\sum \operatorname*{Res}_{\omega} G(\omega, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)\frac{d^2p_1 d^2p_2}{(2\pi)^2}\,,\end{aligned} \qquad (3.43)$$

где сумма вычетов берется по всем полюсам ω функции G в верхней полуплоскости ε, что соответствует заполненным уровням. Интегрируя по частям, получаем

$$\mathcal{P} = ie\int\left[\nabla_{\mathbf{p}}\sum \operatorname*{Res}_{\omega} G(\omega, \mathbf{p}, \mathbf{p}')\right]\Big|_{\mathbf{p}'=\mathbf{p}}\frac{d^2p}{(2\pi)^2}\,. \qquad (3.44)$$

Другую (эквивалентную) форму записи можно получить, если заменить $\nabla_{\mathbf{p}}$ на $\nabla_{\mathbf{p}'}$ и изменить знак.

14в. Взаимодействие с электрическим полем $W = -eEx$ меняет функцию Грина:

$$\widehat{G}_W = \widehat{G} + \widehat{G}\widehat{W}\widehat{G} + \widehat{G}\widehat{W}\widehat{G}\widehat{W}\widehat{G} + \dots , \tag{3.45}$$

где $\widehat{G}$ — точная функция Грина при $E = 0$. Графически это можно представить в виде, показанном на рис. 3.8.

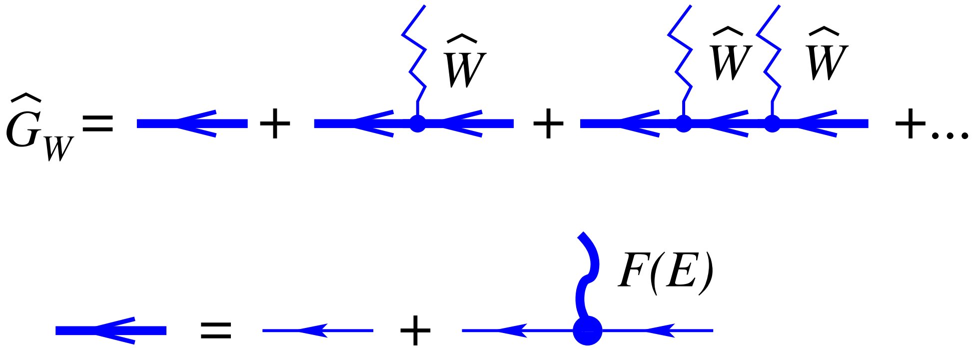


Рис. 3.8

В импульсном представлении взаимодействию W, линейному по координатам, соответствует производная δ-функции:

$$W(\mathbf{p}) = -\int eExe^{-i\mathbf{pr}}\, d^2r = -ie(2\pi)^2 E\frac{\partial}{\partial p_x}\delta^{(2)}(\mathbf{p})\,. \tag{3.46}$$

Для вычисления поляризуемости нужен линейный по полю член ряда (3.45). С учетом структуры G, согласно (3.42), получаем 4 слагаемых, изображенных на рис. 3.9.

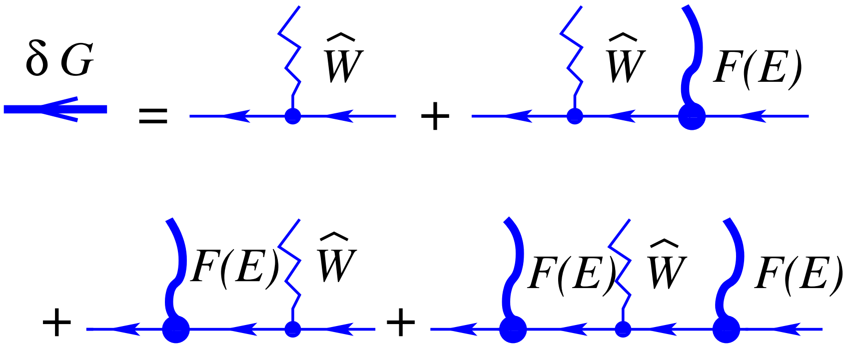


Рис. 3.9

Первое из них есть G_0WG_0. Оно не имеет особенностей над контуром интегрирования по энергии и, поэтому, дает нулевой вклад. Вычислим остальные члены.

Выражение $\widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0\widehat{F}\widehat{G}_0(p,p')$, соответствующее второй диаграмме рис. 3.9, есть:

$$\begin{aligned}&\int \frac{-ieE\,\partial/\partial p_x\,\delta^{(2)}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)}{(\varepsilon-p^2/2m+i\delta)}\frac{F(\varepsilon)}{(\varepsilon-p_1^2/2m+i\delta)(\varepsilon-p'^2/2m+i\delta)}d^2\mathbf{p}_1=\\&\quad=\int\delta(\mathbf{p}_1-\mathbf{p})\frac{\partial}{\partial p_{1x}}\frac{-ie\,E\,F(\varepsilon)}{(\varepsilon-p^2/2m+i\delta)}\times\\&\qquad\times\frac{1}{(\varepsilon-p_1^2/2m+i\delta)\ (\varepsilon-p'^2/2m+i\delta)}d^2\mathbf{p}_1=\\&=-\frac{ieE}{m}F(\varepsilon)\frac{p_x}{(\varepsilon-p^2/2m+i\delta)^3(\varepsilon-p'^2/2m+i\delta)}\,.\end{aligned}\tag{3.47}$$

Третье слагаемое получается из второго комплексным сопряжением и перестановкой p и p':

$$\widehat{G}_0\widehat{F}\widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0(\mathbf{p},\mathbf{p}')=\frac{ieEp'_xF(\varepsilon)/m}{(\varepsilon-p^2/2m+i\delta)(\varepsilon-p'^2/2m+i\delta)^3}.\tag{3.48}$$

Последний график $\widehat{G}_0\widehat{F}\widehat{G}_0\widehat{W}\widehat{G}_0\widehat{F}\widehat{G}_0(p,p')$ равен нулю:

$$\begin{aligned}&ieEF^2(\varepsilon)\iint\frac{d^2p_1\,d^2p_2}{(2\pi)^2}G_0(\varepsilon,\mathbf{p})G_0(\varepsilon,\mathbf{p}_2)G_0(\varepsilon,\mathbf{p}_1)G_0(\varepsilon,\mathbf{p}')\nabla_{1x}\delta(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1)=\\&=-ieEF^2(\varepsilon)G_0(\varepsilon,p)G_0(\varepsilon,\mathbf{p}')\int\frac{d^2p_1}{(2\pi)^2}\frac{p_{1,x}/m}{(\varepsilon-p_1^2/2m+i\delta)^3}=0\,,\end{aligned}\tag{3.49}$$

как интеграл от нечетной функции. Поэтому

$$\sum_\omega \operatorname{Res}G(\omega,\mathbf{p},\mathbf{p}')=\operatorname*{Res}_{\varepsilon_0}F(\varepsilon)\frac{ie}{m}E[p'_xG_0(\varepsilon_0,\mathbf{p})G_0^3(\varepsilon_0,\mathbf{p}')-p_xG_0^3(\varepsilon_0,\mathbf{p})G_0(\varepsilon_0,\mathbf{p}')].\tag{3.50}$$

Из-за отмеченной выше симметрии по отношению к перестановке $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ оба слагаемых дают одинаковый вклад в поляризуемость, поскольку и в выражение (3.44) для дипольного момента $\mathcal{P}$ импульсы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ входят симметрично. Следовательно, достаточно взять только первое слагаемое и удвоить ответ:

$$\mathcal{P}_x=-2\frac{e^2}{m^2}E\int\frac{p_x^2}{(\varepsilon_0-p^2/2m+i\delta)^5}\ \operatorname*{Res}_{\varepsilon_0}F(\varepsilon)\,\frac{d^2p}{(2\pi)^2}\,.\tag{3.51}$$

К такому выражению можно прийти несколько быстрее, если заметить, что вершина взаимодействия с электрическим полем устроена точно так же, как и выражение для дипольного момента (3.44). (В координатном представлении (3.50) есть свертка производной δ-функции с функцией Грина по ее аргументам.) Поэтому все вклады в поляризуемость можно представить графически, как показано на рис. 3.10.

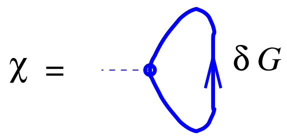


Рис. 3.10

Здесь δG дается суммой четырех слагаемых, показанных на рис. 3.9, а штриховая линия обозначает $\nabla\delta(\mathbf{p})$ в импульсном представлении, или $\mathbf{r}$ — в координатном. Первый график на рис. 3.9 дает нуль при интегрировании по энергиям, а четвертый, из-за нечетности $\mathbf{r}$, — обращается в нуль при интегрировании по импульсам. Второй и третий графики отличны от нуля и равны в силу симметрии.

Итак, поляризуемость

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{m^2}\int \frac{p_\alpha p_\beta (2m)^5}{(p^2+\varkappa^2)^5}\ \operatorname*{Res}_{\varepsilon_0} F(\varepsilon)\frac{d^2p}{(2\pi)^2}\,, \tag{3.52}$$

где $\varkappa^2 = 2m|\varepsilon_0|$.

Вычислим $\operatorname*{Res}_{\varepsilon_0} F(\varepsilon)$. Положив $\varepsilon = \varepsilon_0 + z$, разлагаем

$$F(\varepsilon) = \frac{2\pi}{m\ln(1+z/\varepsilon_0)} \approx \frac{2\pi\varepsilon_0}{mz}, \quad \text{откуда} \quad \operatorname*{Res}_{\varepsilon_0} = \frac{2\pi\varepsilon_0}{m}\,. \tag{3.53}$$

Находим

$$\chi_{\alpha\beta} = e^2m^2\varepsilon_0\int\limits_0^{+\infty}\frac{2^6\pi\,\delta_{\alpha\beta}}{(p^2+\varkappa^2)^5}\frac{p^3\,dp}{2\pi} = \delta_{\alpha\beta}\frac{16e^2m^2\varepsilon_0}{(2m\varepsilon_0)^3}\int\limits_0^{+\infty}\frac{x\,dx}{(x+1)^5} = \frac{e^2\delta_{\alpha\beta}}{6m\varepsilon_0^2}\,. \tag{3.54}$$

Восстанавливая $\hbar$ по размерности, получаем $\chi = e^2\hbar^2/(6m\varepsilon_0^2)$.

15. Суммируем диаграммы, изображенные на рис. 3.2. С одной стороны, раскрывая по линейности и группируя члены, получаем разность $F(\mathbf{k},\mathbf{k}') - F^*(\mathbf{k}',\mathbf{k})$, поскольку все остальные члены, содержащие G^R и G^A одновременно, взаимно сокращаются. С другой стороны,

$$G^R - G^A = \frac{1}{\varepsilon - p^2/2m + i\delta} - \frac{1}{\varepsilon - p^2/2m - i\delta} = -2\pi i\delta\left(\varepsilon - p^2/2m\right)\,. \tag{3.55}$$

Кроме того, при собирании всех графиков, слева от $G^R - G^A$ возникает выражение $F(\mathbf{k},\mathbf{k}')$, а справа — $F^*(\mathbf{k}',\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} -2\pi i\int F(\mathbf{k},\mathbf{q})\,F^*(\mathbf{k}',\mathbf{q})\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\delta\left(\varepsilon - q^2/2m\right) &= \qquad (3.56)\\ = -2\pi i\int F(\mathbf{k},\mathbf{q})\,F^*(\mathbf{k}',\mathbf{q})\frac{m}{q}\,\delta(|\mathbf{q}|-|\mathbf{k}|)\,do\,\frac{q^2\,dq}{(2\pi)^3} &= -\frac{imk}{(2\pi)^2}\int F(\mathbf{k},\mathbf{q})\,F^*(\mathbf{k}',\mathbf{q})\,do\,. \end{aligned}$$

Сравнивая результаты, получаем теорему унитарности для амплитуды F:

$$F(\mathbf{k},\mathbf{k}') - F^*(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{imk}{(2\pi)^2}\int F(\mathbf{k},\mathbf{q})F^*(\mathbf{k}',\mathbf{q})\,do\,. \tag{3.57}$$

Связь с квантовомеханической амплитудой рассеяния, $F = -(2\pi\hbar^2/m)\,f$, была найдена в задаче 11. Выражая F через f, приходим к теореме унитарности (3.15).

Повторяя вывод в двумерном случае, получаем

$$F(\mathbf{k},\mathbf{k}') - F^*(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{im}{2\pi}\int F(\mathbf{k},\mathbf{q})F^*(\mathbf{k}',\mathbf{q})\,d\theta\,. \tag{3.58}$$

В размерности $D = 2$ связь F и квантовомеханической амплитуды f другая. Чтобы ее получить, поступим как в задаче 11. Возьмем выражение (3.21) для расходящейся волны, $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|G_0 F|\mathbf{k}\rangle$, верное в любой размерности, и найдем асимптотическое поведение функции G_0:

$$G_0(\varepsilon,\mathbf{r}) = \int \frac{e^{i\mathbf{pr}}}{\varepsilon - \hbar^2 p^2/2m + i\delta}\frac{d^2p}{(2\pi)^2} \;\approx\; -\frac{m}{\hbar^2\sqrt{2\pi k|\mathbf{r}|}}e^{ik|\mathbf{r}|+i\pi/4} \tag{3.59}$$

при $k|\mathbf{r}| \to \infty$ (см. задачу 6 к § 126 [2]). Поэтому при $D = 2$ амплитуда $f = -(m/\hbar^2\sqrt{2\pi k})\,F$.

Поэтому теорема унитарности при $D = 2$ гласит:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') - f^*(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = i\sqrt{\frac{k}{2\pi}}\int f(\mathbf{k},\mathbf{q})\,f^*(\mathbf{k}',\mathbf{q})\,do_q\,. \tag{3.60}$$

Отметим, что в размерности $D = 2$ более удобно включать множитель $e^{i\pi/4}$ в определение расходящейся волны, как это сделано выше, а не в амплитуду рассеяния, как в [2]. При таком определении f, соотношение унитарности принимает наиболее простой вид. Поскольку амплитуда f есть коэффициент при расходящейся волне, включать фазовый множитель в определение f или в выражение для расходящейся волны — дело вкуса.

Воспользуемся случаем, чтобы еще раз отметить существенную разницу между обычной амплитудой f и амплитудой рассеяния в энергетической нормировке F («ужирненной вершиной»). Определение амплитуды F не допускает никакого произвола, поскольку не зависит от выбора выражения для расходящейся волны.

Глава 4.

Взаимодействующие частицы

4.1. Правила построения диаграмм

Функции Грина дают полную информацию об основном состоянии системы и спектре ее возбуждений. Кроме того, важнейшим свойством причинных функций Грина (2.8) является то, что с их помощью можно построить теорию возмущений, согласующуюся с интуитивными представлениями. Функция Грина $G(x_2, x_1) = -i\langle \mathrm{T}\psi(x_2)\psi^+(x_1)\rangle$ в координатном представлении есть амплитуда вероятности перехода из точки x_1 пространства–времени в точку x_2. Естественно сопоставить ей линию со стрелкой, ведущую из x_1 в x_2 (рис. 4.1).

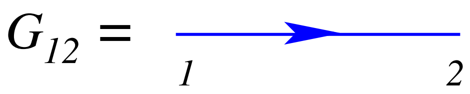


Рис. 4.1

Для невзаимодействующих ферми-частиц функция Грина в импульсном представлении дается простой формулой:

$$G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta(\mathbf{p})}\,. \tag{4.1}$$

Здесь $\xi(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m - E_F$ — закон дисперсии частиц, а знак мнимой части зависит от заполнения состояния с импульсом $\mathbf{p}$:

$$\delta(\mathbf{p}) = 0\,\mathrm{sign}(\xi(\mathbf{p})) = \begin{cases} +0\ , & \text{если состояние не заполнено;} \\ -0\ , & \text{если состояние заполнено.} \end{cases} \tag{4.2}$$

Ряд теории возмущений для функции Грина допускает удобное графическое представление в виде диаграмм. Вывод правил диаграммной техники читатель может найти в гл. 2 [1]. Мы же приведем здесь лишь краткую их сводку для случая двухчастичного взаимодействия

$$U(x - x') = U(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')\,. \tag{4.3}$$

Вообще говоря, взаимодействие может быть запаздывающим.

1) Все диаграммы строятся из двух элементов: простых линий, описывающих распространение частиц, и волнистых, описывающих взаимодействие между ними.

2) Две простые линии и одна волнистая соединяются в *вершинах*.

3) n–у порядку теории возмущений соответствуют диаграммы с $2n$ вершинами. Если речь идет о вычислении функции Грина, то диаграмма должна иметь ровно два внешних конца.

4) Все диаграммы должны быть *связными*, т. е. не должны распадаться на отдельные части, не соединенные между собой ни одной линией.

5) Каждой простой линии соответствует множитель $G_0(x-x')$, где x — начальная точка, x' — конечная. Каждой волнистой линии сопоставляется множитель $U(x - x')$.

6) Выражение, соответствующее данной диаграмме, следует проинтегрировать по координатам ее вершин.

7) После этого ответ следует умножить на $i^n\,(-1)^F$, где n — число волнистых линий, а F — число замкнутых петель, отвечающих ферми-частицам.

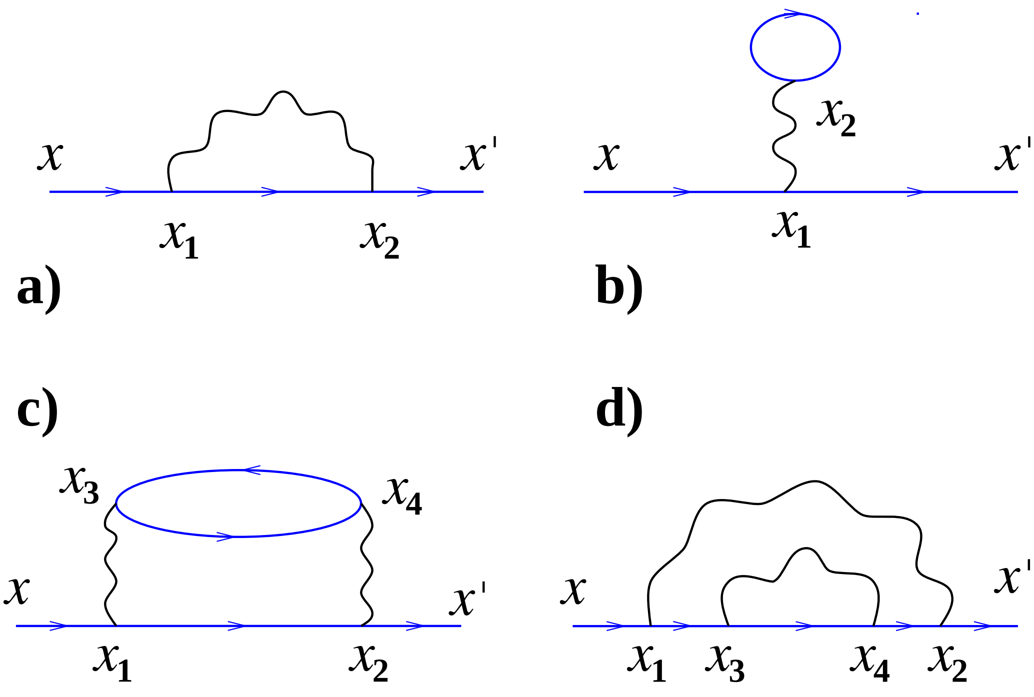


Рис. 4.2

Примеры диаграмм показаны на рис. 4.2. Этим диаграммам соответствуют такие выражения:

$$
\begin{aligned}
\delta G_{\mathrm{a}} &= i\int d^4x_1\,d^4x_2\,G(x_1-x)\,G(x_2-x_1)\,G(x'-x_2)\,U(x_2-x_1)\,,\\
\delta G_{\mathrm{b}} &= -i\int d^4x_1\,d^4x_2\,G(x_1-x)\,G(0)\,G(x'-x_1)\,U(x_2-x_1)\,,\\
\delta G_{\mathrm{c}} &= \int d^4x_1\,d^4x_2\,d^4x_3\,d^4x_4 G(x_3-x_4)\,G(x_4-x_3)\times\\
&\quad\times G(x_2-x_1)\,G(x'-x_2)\,G(x_1-x)\,U(x_3-x_1)\,U(x_4-x_2)\,,\\
\delta G_{\mathrm{d}} &= -\int d^4x_1\,d^4x_2\,d^4x_3\,d^4x_4 G(x_3-x_2)\,G(x_4-x_3)\times\\
&\quad\times G(x_2-x_1)\,G(x'-x_4)\,G(x_1-x)\,U(x_4-x_1)\,U(x_3-x_2)\,.
\end{aligned}
$$

Довольно часто удобным оказывается не координатное представление, а импульсное. Правила диаграммной техники в импульсном представлении оказываются почти такими же, как в координатном. Вместо функций Грина и потенциалов взаимодействия надо использовать их фурье-образы. При этом каждой вершине сопоставляется множитель $(2\pi)^4\delta(p_1+k-p_2)$, определяющий связь между 4-импульсами p_1 и p_2 функций Грина частиц, и 4-импульсом k линии взаимодействия. По всем независимым 4-импульсам производится интегрирование.

Различные диаграммы удобно представлять себе как вклады в амплитуду перехода частиц между точками x и x'. Например, переход, при котором не происходит взаимодействия с другими частицами системы, изображается свободной функцией Грина, а переходам с рассеянием на других частицах соответствуют диаграммы, подобные *b)* и *c* на рис. 4.2. Диаграммная техника позволяет думать о многочастичных задачах на «одночастичном языке».

Два основных вида взаимодействия между электронами, имеющих значение в физике твердого тела, — это кулоновское взаимодействие и взаимодействие за счет обмена фононами. Кулоновское взаимодействие в среде выражается через диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$. В импульсном представлении

$$
U(\omega,\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon(\omega)|\mathbf{k}|^2}\,, \qquad |\mathbf{k}| \gg \omega/c\,. \tag{4.4}
$$

Частотная дисперсия $\varepsilon(\omega)$ делает взаимодействие запаздывающим:

$$
U(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t') = \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\int \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\varepsilon(\omega)}\frac{d\omega}{2\pi}\,. \tag{4.5}
$$

Это «квазистатическое» выражение справедливо при $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \ll c|t-t'|$. Запаздывание взаимодействия приводит к таким физическим эффектам, как перенормировка массы связанного состояния (см. задачу 19).

Взаимодействие, возникающее вследствие испускания и поглощения фононов, зависит от типа фононов, а также от характера электрон–фононного взаимодействия в системе (подробнее см. гл. 6). В качестве простейшей, но в то же время реалистичной модели мы рассмотрим акустические фононы, взаимодействующие с электронами посредством деформационного потенциала. В этом случае взаимодействие принимает вид

$$U(\omega, \mathbf{k}) = g^2 D(\omega, \mathbf{k}) \,, \tag{4.6}$$

где g — константа электрон-фононного взаимодействия, а

$$D(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i0} \tag{4.7}$$

— функция Грина фононов. Для акустических фононов $\omega_0(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$, где c — скорость звука (подробнее о фононах и электрон–фононном взаимодействии — см. разд. 6.1).

4.1.1. Блочное суммирование.

В диаграммной технике можно не только выписывать вклад данного порядка теории возмущений, но и суммировать некоторые последовательности членов ряда. При этом оказывается достаточным вычислить относительно небольшое количество диаграмм (*блоков*), после чего можно суммировать образованные из них последовательности, подставлять их в другие диаграммы и т. д.

Техника блочного суммирования опирается на классификацию диаграмм на *приводимые* и *неприводимые*. Неприводимой называется собственно-энергетическая часть, которая не распадается при перерезании ни одной из линий частиц. В противном случае диаграмма называется приводимой.

Блочное суммирование для одночастичной функции Грина выполняется так. Рассмотрим произвольную диаграмму для функции Грина $G(\varepsilon, \mathbf{p})$. Она либо приводима, либо нет. Если она приводима, то разделим ее на две части, соединенные одной линией. Каждая из этих частей либо приводима, либо нет. Будем дробить таким способом приводимые диаграммы до тех пор, пока процесс не закончится. Любая диаграмма для функции Грина может быть схематически представлена как одна из диаграмм, изображенных на рис. 4.3.

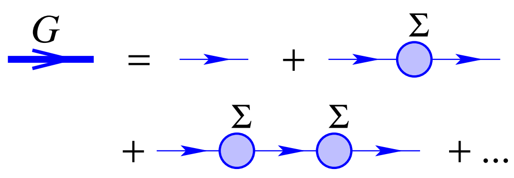


Рис. 4.3

Кружки на рис. 4.3 могут изображать любые неприводимые диаграммы, показанные на рис. 4.4. Сумма последовательности всех неприводимых диаграмм называется *собственно-энергетической частью* и обозначается[1] $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$.

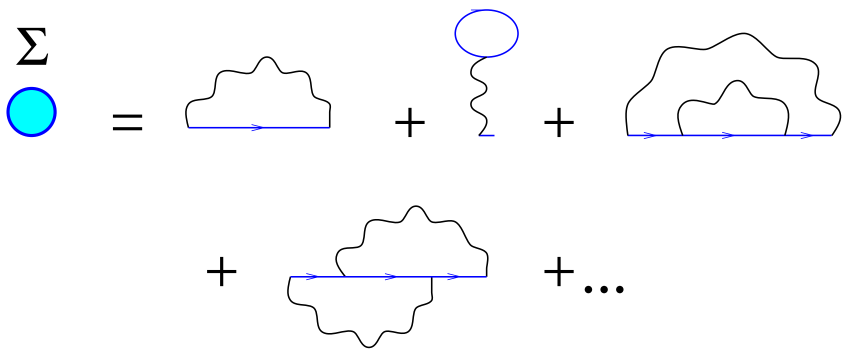


Рис. 4.4

Теперь просуммируем все диаграммы для функции Грина. Содержимое каждого кружка при этом превращается в $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$. В результате ряд для $G(\varepsilon, \mathbf{p})$ запишется так:

$$G = G_0 + G_0\Sigma G_0 + G_0\Sigma G_0\Sigma G_0 + \ldots \quad . \tag{4.8}$$

Как нетрудно видеть, сумма этого ряда удовлетворяет уравнению

$$G = G_0 + G_0\Sigma G\,, \tag{4.9}$$

называемому уравнением Дайсона. Его решение выглядит так:

$$G^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) = G_0^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) - \Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})\,. \tag{4.10}$$

Уравнение Дайсона дает точную связь между $G(\varepsilon,\ \mathbf{p})$ и $\Sigma(\varepsilon,\ \mathbf{p})$, т. е. между суммами всех приводимых и всех неприводимых диаграмм.

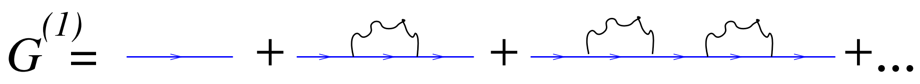


Рис. 4.5

Конечно, найти $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ в явном виде, как правило, не удается. Однако, вычислив, скажем, первую из диаграмм на рис. 4.4, мы можем сразу просуммировать целую

[1] В теории поля $\Sigma(\varepsilon, p)$ иногда называется массовым оператором.

последовательность диаграмм для $G(\varepsilon, \mathbf{p})$, как показано на рис. 4.5. Далее можно подставлять полученное выражение для $G(\varepsilon, \mathbf{p})$ в другие диаграммы вместо $G_0(\varepsilon, \mathbf{p})$. Графически это изображают, рисуя вместо светлой линии жирную.

Может возникнуть вопрос, зачем вообще суммировать последовательность диаграмм из разных порядков теории возмущений. Дело в том, что функция Грина $G(\varepsilon, \mathbf{p})$ обычно представляет интерес вблизи своего полюса (см. (4.12)). В этой области различные диаграммы на рис. 4.5 на самом деле оказываются одного порядка. А собственно-энергетическая часть, в отличие от функции Грина, имеет, как правило, не очень сингулярное поведение. Поэтому ее можно изучать с помощью одного или нескольких первых членов ряда теории возмущений.

4.2. Полюсы функции Грина — спектр квазичастиц

Мы описали формализм диаграммной техники, не уточняя, о какой задаче идет речь — одночастичной или многочастичной. Функции Грина позволяют легко переходить от одной задачи к другой. Разница между этими двумя случаями заключается в структуре затравочной функции Грина (4.1). Для ферми-газа мнимая часть

$$i\delta(\mathbf{p}) = i0 \,\mathrm{sign}(|\mathbf{p}| - p_0)\,, \tag{4.11}$$

где p_0 — импульс Ферми (этим выражается то, что все состояния с $|\mathbf{p}| < p_0$ заполнены, а остальные пусты). Такая функция Грина учитывает то обстоятельство, что при $|\mathbf{p}| > p_0$ возбуждениями являются частицы, а при $|\mathbf{p}| < p_0$ — дырки.

Если же речь идет об одночастичной задаче, то следует считать $\delta(\mathbf{p}) > 0$ для всех $\mathbf{p}$, поскольку все состояния пусты. В этом случае диаграммный ряд сильно упрощается. Дело в том, что в этом случае все диаграммы с замкнутыми электронными петлями оказываются равны нулю. Формально это происходит потому, что интеграл по частоте в любой петле обращается в нуль, поскольку полюсы всех функций Грина находятся в одной и той же полуплоскости комплексной частоты. Физическую причину обращения петель в нуль можно пояснить, заметив, что в ферми-газе замкнутые петли описывают рождение электрон-дырочных пар. В одночастичной же системе рождение пар невозможно.

Функция Грина (4.10) имеет полюс, если ε и $\mathbf{p}$ удовлетворяют уравнению

$$G_0^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})\,. \tag{4.12}$$

В одночастичной задаче полюсы функции Грина определяют весь спектр системы. В многочастичной же задаче оказывается, что полюсы $G(\varepsilon, \mathbf{p})$ определяют не весь спектр, а только так называемые *одночастичные* возбуждения.

В точной функции Грина

$$G(\varepsilon,\, \mathbf{p}) = -i \int \langle \mathrm{T}\, \psi(\mathbf{r},\, t)\, \psi^{+}(0,0)\rangle\, e^{i\varepsilon t - i\mathbf{p}\mathbf{r}}\, d^3r\, dt\,, \tag{4.13}$$

вычисленной с учетом взаимодействия, обычно выделяют вклад *элементарных возбуждений* или *квазичастиц* — полюсы в комплексной плоскости ε, расположенные недалеко от вещественной оси:

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{a}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\gamma(\mathbf{p})} \; + \; G_{\rm reg}(\varepsilon, \mathbf{p})\,. \tag{4.14}$$

(в выражении (4.14) выделен вклад $G_{\rm reg}(\varepsilon, \mathbf{p})$, регулярный вблизи $\varepsilon = \xi(\mathbf{p}) - i\gamma(\mathbf{p})$).

Спектр квазичастицы, соответствующей полюсу в (4.14), дается функцией $\xi(\mathbf{p})$, а затухание $\gamma(\mathbf{p})$ можно записать как $1/(2\tau_{\mathbf{p}})$, где $\tau_{\mathbf{p}}$ — время жизни квазичастицы. Вычет a называют амплитудой квазичастичной функции Грина. Дисперсионное соотношение $\varepsilon = \xi(\mathbf{p})$ определяет в 4-мерном пространстве $(\varepsilon, \mathbf{p})$ так называемую *массовую поверхность* квазичастицы ([1], § 7, п. 3; [4], гл. 5, п. 1).

Вообще говоря, понятие квазичастицы имеет смысл только если время жизни велико: $\gamma(\mathbf{p}) \ll \xi(\mathbf{p})$. Если оно мало, говорят о «затухающем возбуждении». В ядерной физике терминология несколько иная: вместо «квазичастицы» говорят о «резонансе».

Остановимся на физическом смысле собственно-энергетической части $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$. Из дисперсионного уравнения (4.10) видно, что именно собственно энергетическая часть определяет спектр квазичастиц. Рассматривая по отдельности вещественную и мнимую части (4.10) и сравнивая с (4.14), находим

$$\xi(\mathbf{p}) = \xi_0(\mathbf{p}) + \mathrm{Re}\;\Sigma(\,\xi(\mathbf{p}),\, \mathbf{p}\,)\,, \quad \gamma(\mathbf{p}) = \mathrm{Im}\,\Sigma(\,\xi(\mathbf{p}),\, \mathbf{p}\,)\,. \tag{4.15}$$

Как видно из (4.15), вещественная часть $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ характеризует перенормировку закона дисперсии квазичастиц. В частности, $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ описывает такой эффект, как изменение массы частицы, возникающее в результате взаимодействия. Причина изменения массы в том, что частица во взаимодействующей системе окружает себя «поляризационным облаком», движущимся вместе с частицей. Инерция такой «одетой» частицы описывается так называемой *эффективной* массой. Пример, демонстрирующий возникновение эффективной массы в случае электрон–фононного взаимодействия, будет рассмотрен в задаче 16 (см. также задачи 19, 21 и 33).

Что касается мнимой части $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$, то она характеризует затухание квазичастиц. Величина $\tau_{\mathbf{p}} = 1/(2\gamma(\mathbf{p}))$ есть время жизни частицы в состоянии с данным импульсом $\mathbf{p}$. Например, электрон, взаимодействующий с фононами, если он движется достаточно быстро, может излучать фононы. В результате движение такого электрона замедлится, что формально проявится в появлении конечной мнимой части у $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ (см. задачу 17). Разумеется, конечное затухание $\gamma = \mathrm{Im}\,\Sigma(\varepsilon,\, \mathbf{p})$ не означает, что сам электрон распадается. Правильная интерпретация затухания заключается в том, что с вероятностью $P(t) = |\langle\psi(t)|\psi(0)\rangle|^2 = \exp(-2\gamma t)$ состояние электрона за время t не изменяется.

Интересно, что в силу причинности $\mathrm{Re}\,\Sigma$ и $\mathrm{Im}\,\Sigma$ связаны между собой соотношениями, аналогичными соотношениям Крамерса-Кронига. Таким образом, зная $\mathrm{Re}\,\Sigma$, можно найти $\mathrm{Im}\,\Sigma$, и наоборот.

4.2.1. Двухчастичная функция Грина

Из функции Грина $G(\varepsilon, \mathbf{p})$, описывающей распространение одной частицы, невозможно получить информацию о связанных состояниях частиц. Поэтому вводится так называемая *двухчастичная функция Грина*

$$K_{ab}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \pm \langle \mathrm{T}\, \psi_a(x_1)\, \psi_b(x_2)\, \psi_a^+(x_3)\, \psi_b^+(x_4) \rangle \,. \tag{4.16}$$

Знак «+» соответствует бозонам, а знак «−» — фермионам. Индексы a и b нумеруют частицы (здесь речь идет о различимых частицах).

В невзаимодействующей системе функция $K_{ab}(x_1, ..., x_4)$ распадается на произведение одночастичных функций Грина частиц a и b:

$$K_{ab}(x_1, x_2, x_3, x_4) = G_a(x_1 - x_3)\, G_b(x_2 - x_4) \tag{4.17}$$

(если частицы тождественны, то нужно в зависимости от типа статистики прибавить или вычесть произведение функций Грина с переставленными аргументами).

Теория возмущений для функции K_{ab} строится точно так же, как для одночастичной функции Грина. Первые несколько диаграмм, дающих вклад в K_{ab}, показаны на рис. 4.6. Предполагается, что функции Грина в этих диаграммах — точные (т. е. все линии частиц — жирные).

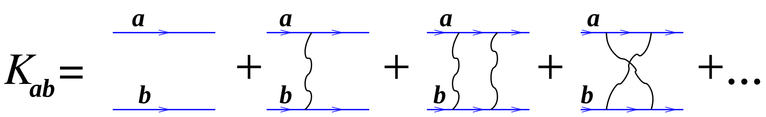


Рис. 4.6

Принято исключать из $K_{ab}(x_1, x_2, x_3, x_4)$ тривиальные слагаемые, вводя *вершинную часть* $\Gamma_{ab}(x_1, x_2; x_3, x_4)$:

$$K_{ab}(x_1, x_2, x_3, x_4) = G_a(x_1 - x_3)\, G_b(x_2 - x_4) + i \int G_a(x_1 - x_1')\, G_a(x_3' - x_3) \times$$
$$\times G_b(x_2 - x_2')\, G_b(x_4' - x_4)\, \Gamma_{ab}(x_1', x_2'; x_3', x_4')\, d^4x_1'\, d^4x_2'\, d^4x_3'\, d^4x_4' \,. \tag{4.18}$$

Величина Γ_{ab} описывает взаимодействие частиц, ее иногда называют *двухчастичной амплитудой рассеяния.*

В импульсном представлении величина Γ_{ab} имеет вид

$$\Gamma_{ab}(p_1, p_2, p_3, p_4) = \int \Gamma_{ab}(x_1, x_2; x_3, x_4)\, e^{-i(p_1x_1 + ... + p_4x_4)}\, d^4x_1 ... d^4x_4 \;, \tag{4.19}$$

где p_i — 4–импульсы. Диаграммы для Γ_{ab} выглядят как показано на рис. 4.7.

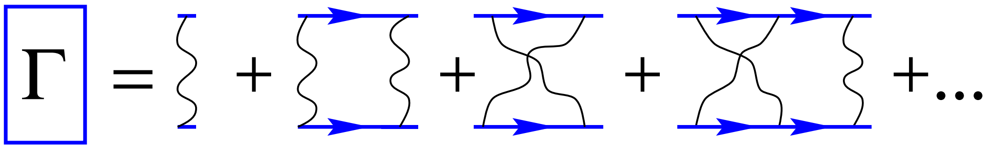


Рис. 4.7

Сумма 4–импульсов p_i сохраняется: $p_1 + p_2 = p_3 + p_4$. Графическим элементам соответствуют обычные аналитические выражения: функции Грина $G(p)$, линии взаимодействия $U(p)$, интегрирование по каждому внутреннему импульсу.

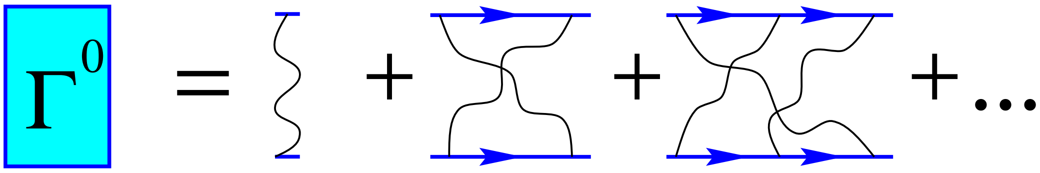


Рис. 4.8

Для двухчастичных функций Грина, как и для одночастичных, оказывается возможным суммирование бесконечных последовательностей диаграмм. Назовем диаграмму *двухчастично-неприводимой*, если она не распадается при разрезании любой пары линий $G(p)$. Сумма всех двухчастично–неприводимых диаграмм определяет так называемую *неприводимую вершинную часть* Γ^0 (рис. 4.8). Пользуясь этим определением, представим любую диаграмму для Γ_{ab} как последовательность неприводимых частей, соединенных двумя линиями $G(p)$. Классифицируя диаграммы по количеству двухчастичных сечений, можно убедиться, что амплитуда $\Gamma_{ab}(p_i)$ удовлетворяет *уравнению Бете–Солпитера*:

$$\Gamma_{ab}(p_i) = \Gamma^0_{ab}(p_i) + i \int \Gamma^0_{ab}(p'_i) G^{(1)}_a(p_{1+}) G^{(2)}_b(p_{2-})\, \Gamma_{ab}(p''_i) \frac{d^4k}{(2\pi)^4}\,, \tag{4.20}$$

где $p_i = \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$, $p'_i = \{p_1, p_2, p_{1+}, p_{2-}\}$, $p''_i = \{p_{1+}, p_{2-}, p_3, p_4\}$, а $p_{i\pm} = p_i \pm k$. Уравнение Бете–Солпитера (4.20) графически изображают как показано на рис. 4.9. Имея в виду такое графическое представление, неприводимую вершинную часть $\Gamma^0(p_i)$

в (4.20) часто называют также «неразрезаемый кирпич».

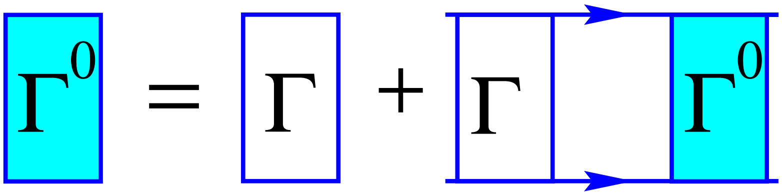


Рис. 4.9

Как и одночастичные функции Грина, двухчастичная амплитуда рассеяния может иметь полюсы. Эти полюсы соответствуют связанным состояниям пары частиц (см. задачи 18, 19, а также гл. 3).

Литература: Доказательство правил построения диаграмм приведено в [1], § 8, 9 и в [6], § 13. О суммировании диграммного ряда для функции Грина с помощью собственно-энергетической части и уравнения Дайсона можно прочитать в [1], § 10 и в [6], § 14. Двухчастичная функция Грина, её связь с амплитудой рассеяния, а также уравнение Бете–Солпитера рассмотрены в [6], § 15, 16. Хорошее изложение основ теории полярона, включая применение функций Грина в случае слабой связи и вариационного принципа в случае сильной связи можно найти в [3], гл. 8.

4.3. Задачи 16 – 21

Задача 16. (*Полярон в приближении слабой связи.*) Электроны в зоне проводимости полупроводника образуют сильно разреженный газ. При малой концентрации электронов их взаимодействием друг с другом можно пренебречь. В то же время, каждый отдельный электрон, двигаясь в кристаллической решетке, поляризует среду вокруг себя и вызывает сопутствующую ему деформацию. Такой окруженный фононами электрон называется *поляроном.*

Закон дисперсии полярона $\varepsilon(\mathbf{p})$ — не такой, как у электрона. При скорости движения, малой по сравнению со скоростью звука, полярон характеризуется энергией связи ε_0 и эффективной массой m^*: $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_0 + \mathbf{p}^2/2m^*$.

Найдите собственно-энергетическую часть $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ в низшем порядке по электрон-фононному взаимодействию (4.6),(4.7). Соответствующий график изображен на рис. 4.10.

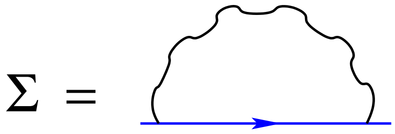


Рис. 4.10

Электронная функция Грина на рис. 4.10 имеет вид

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{p}^2/2m + i\delta}\,. \tag{4.21}$$

Положительный знак мнимой части δ говорит об отсутствии электронов в зоне проводимости полупроводника.

Рассмотрите $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ вблизи массовой поверхности $\varepsilon = \mathbf{p}^2/2m$ и при малых $|\mathbf{p}| \ll mc$. Получите разложение:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \varepsilon_0 - \alpha_1 \left(\varepsilon - \mathbf{p}^2/2m\right) - \alpha_2\, \mathbf{p}^2/2m\,. \tag{4.22}$$

Покажите, что величина α_2 определяет перенормировку массы m, величина α_1 — перенормировку амплитуды Z функции Грина (4.14), а ε_0 дает энергию связи. Найдите эффективную массу полярона.

Задача 17. (*Черенковское излучение звука.*) Величина $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$, найденная в задаче 16, имеет отличную от нуля мнимую часть при $v = p/m > c$, поскольку сверхзвуковой электрон может испускать фононы.

а) Запишите $\operatorname{Im}\Sigma$ как $\int W(\theta)d\theta$, где θ — угол между направлением вылета фонона и импульсом $\mathbf{p}$. Найдите угловое распределение излучаемого звука.

б) Эту же задачу решите с помощью теории возмущений. Найдите вероятность излучения фонона в единицу времени под углом θ, используя «золотое правило» для вероятности перехода в непрерывный спектр:

$$dW_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}} = \tfrac{2\pi}{\hbar}\left|\langle \mathrm{f}|\mathcal{H}_{\mathrm{int}}|\mathrm{i}\rangle\right|^2\, \delta(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}})\, d\nu_{\mathrm{f}} \tag{4.23}$$

(см. [2], § 43, формула (43.1); [3], гл. 8).

Сравните результаты. Обратите внимание, что при записи вероятности излучения как $\operatorname{Im}\Sigma$, не нужно заботиться о нормировке состояний и о правильной размерности — все уже предусмотрено определением функций Грина.

Задача 18. (*Связанное состояние двух частиц.*) Пусть две частицы с массами m_1 и m_2 взаимодействуют по закону $U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, t_1 - t_2)$, т. е. взаимодействие запаздывающее. Предположим, что запаздывание мало. Ситуации, в которых взаимодействие оказывается слабо запаздывающим, могут быть самыми различными. Например, экситон в полупроводнике — водородоподобное связанное состояние электрона и дырки. Или, скажем, дейтрон — слабо связанное состояние протона и нейтрона, взаимодействующих посредством ядерных сил.

Общая задача о связанном состоянии двух взаимодействующих частиц решается с помощью уравнения Бете–Солпитера для двухчастичной амплитуды рассеяния (4.20). Рассмотрим, какие упрощения возникают, если запаздывание взаимодействия отсутствует, или если оно невелико.

а) (*Мгновенное взаимодействие: задача сводится к одночастичной.*) Пусть запаздывания нет: $U_{12} = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\,\delta(t_1 - t_2)$. Покажите, что в этом случае все диаграммы с пересекающимися линиями дают нуль при интегрировании по частотам, а следовательно $\Gamma^0_{p_1,p_2,p_1+q,p_2-q} = U(q)$.

Выполнив интегрирование в уравнении Бете–Солпитера (4.20), перейдите к импульсам относительно центра масс:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4\,, \tag{4.24}$$

$$\mathbf{k} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}\,, \quad \mathbf{k}' = \frac{m_2\mathbf{p}_3 - m_1\mathbf{p}_4}{m_1 + m_2}\,, \tag{4.25}$$

и приведите (4.20) к виду

$$\Gamma_P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \int \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{q})\Gamma_P(\mathbf{q}, \mathbf{k}')}{\Omega_0 - q^2/2\mu + i0}\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,. \tag{4.26}$$

Здесь приведенная масса $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$, частота $\Omega_0 = \Omega - P^2/2M$, где полная масса $M = m_1 + m_2$ и $\Omega = \omega_1 + \omega_2 = \omega_3 + \omega_4$. Обратите внимание, что на массовой поверхности относительного движения, где $\Omega_0 = k^2/2\mu = k'^2/2\mu$, уравнение (4.26) совпадает с уравнением для амплитуды рассеяния F (3.13) с точностью до замены массы на приведенную (см. [1], § 25, пп. 3, 4).

б) (*Слабое запаздывание.*) Пусть взаимодействие запаздывающее:

$$U_{12} = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\ e^{-|t_1 - t_2|/\tau}/(2\tau)\,, \tag{4.27}$$

но τ много меньше всех других характерных времен. Тогда диаграммы, входящие в неприводимую часть Γ^0, будут тем меньше по параметру τ, чем больше в них пересекающихся линий.

Покажите, что степень τ, которой пропорциональна каждая диаграмма, определяется только числом линий взаимодействия. Верно ли это для диаграмм, дающих полную амплитуду Γ?

Задача 19*. (*Эффективная масса связанного состояния.*) Из задачи 18 а следует, что, если составная частица массы M является связанным состоянием двух частиц массы m, взаимодействующих без запаздывания, то $M = 2m$. (Почему?)

Пусть теперь взаимодействие обладает небольшим запаздыванием, и дается выражением (4.27) задачи 18 б. Покажите, что масса составной частицы в этом случае есть:

$$M = 2m - \frac{2\tau^2}{3}\int \psi_0^2(\mathbf{r})\,\nabla^2 U(\mathbf{r})\,d^3r\ , \tag{4.28}$$

где $\psi_0(r)$ — основное состояние частицы массы $m/2$, движущейся в потенциале $U(r)$. Можно ли понять качественно, почему поправка отрицательна?

Для решения задачи перейдите в систему центра масс, движущуюся со скоростью $\mathbf{v} = \mathbf{P}/2m$. Покажите, что взаимодействие в этой системе имеет вид

$$U_{12}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{U(\mathbf{q})}{1 + \tau^2(\omega - \mathbf{v}\mathbf{q})^2}\,. \tag{4.29}$$

В области $\omega\tau \ll 1$ можно положить $\omega = 0$, т. е. считать взаимодействие мгновенным, и воспользоваться результатом задачи 18 а.

Примером реальной системы, к которой применим изложенный метод, является экситон в полупроводнике, диэлектрическая проницаемость которого обладает частотной дисперсией $\varepsilon(\omega)$. Из-за частотной дисперсии кулоновское взаимодействие (4.4), (4.5) между образующими экситон электроном и дыркой становится запаздывающим, что приводит к уменьшению эффективной массы экситона.

Формула (4.29) подразумевает, что переносящие взаимодействие частицы — *нерелятивистские*, т. е. подчиняются преобразованию Галилея, а не Лоренца. В релятивистской динамике инертная масса, определяемая с помощью $\mathbf{p} = M\mathbf{v}$, тождественна массе покоя $M = 2m - \Delta E/c^2$, где ΔE — энергия связи.

Интересно отметить, что знак перенормировки массы связанного состояния, даваемой нашим нерелятивистским вычислением, согласуется с ответом для релятивистского взаимодействия. (Скажем, масса дейтрона $m_d = m_p + m_n - \Delta_d/c^2$, где Δ_d — энергия связи дейтрона.) Но, конечно же, рассматриваемый нами эффект не имеет никакого отношения к теории относительности. В частности, изменение массы за счет запаздывания взаимодействия как правило оказывается заметно больше, чем релятивистский дефект массы $\Delta E/c^2$.

Задача 20. (*Функции Грина для фермионной цепочки.*) Спектр квазичастиц $\varepsilon(p)$ дается полюсами функции Грина $G(\varepsilon, p)$. Используя этот факт, решим задачу 2 другим способом. Представим гамильтониан (1.20) в виде суммы «невозмущенного гамильтониана» и «возмущения», $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\rm int}$, где

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left(J_1 a_i^+ a_{i+1} + J_1 a_{i+1}^+ a_i - 2B a_i^+ a_i \right); \tag{4.30}$$

$$\mathcal{H}_{\rm int} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left(J_2 a_i a_{i+1} + J_2 a_{i+1}^+ a_i^+ \right). \tag{4.31}$$

Найдите функцию Грина $G_0(\varepsilon, p)$ для задачи, описываемой гамильтонианом $\mathcal{H}_0$. Нарисуйте графики, сумма которых даёт точную функцию Грина. Обратите внимание, что только четные порядки теории возмущений по $\mathcal{H}_{\rm int}$ дают вклад. Вычислите каждую из диаграмм, как функцию ε и p, и просуммируйте ряд.

Задача 21*. (*Тяжелая частица в ферми-газе.*) Рассмотрим атом массы M, движущийся в ферми-газе и взаимодействующий с ферми-частицами. В условиях, когда масса атома M много больше массы фермионов m, рассеяние легких фермионов на тяжелой частице квазиупругое, поскольку при максимально возможном переданном при столкновении импульсе $\Delta p = 2p_0$ величина переданной энергии $\varepsilon_M = \Delta p^2/2M \ll E_F$.

В отсутствие рассеяния функция Грина частицы дается обычным выражением:

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - p^2/2M + i0}. \tag{4.32}$$

Чтобы выяснить, как взаимодействие с фермионами влияет на динамику частицы, найдем функцию Грина частицы в присутствии слабого контактного взаимодействия $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \lambda\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.

а) Поскольку фермионы движутся намного быстрее частицы, естественно воспользоваться «адиабатическим» приближением, в котором динамика фермионов исключена и заменена эффективным запаздывающим взаимодействием частицы самой с собой. Покажите, что эффективное взаимодействие возникает во втором порядке по взаимодействию с фермионами λ и представляет собой не что иное, как коррелятор плотность–плотность ферми-газа.

б) Найдите собственно–энергетическую часть частицы в первом порядке по эффективному взаимодействию. Изучите результат при энергии частицы $\varepsilon \ll \varepsilon_M$ и $\varepsilon \gg \varepsilon_M$. Покажите, что при не слишком малом λ и $\varepsilon \approx \varepsilon_M$ перенормировка функции Грина может быть логарифмически велика. Пользуясь теорией возмущений, просуммируйте все логарифмически большие вклады и покажите, что в области энергий $\varepsilon_M \ll \varepsilon \ll E_F$ функция Грина имеет степенной вид

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) \ = \ \frac{a_0}{\left(\varepsilon - p^2/2M + i0\right)^{1+\alpha}}\,, \tag{4.33}$$

где показатель степени α зависит от силы взаимодействия λ.

4.4. Решения задач 16 – 21

16. Вычисляем собственно-энергетическую часть

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = ig^2 \int G_0(\varepsilon - \omega, \mathbf{p} - \mathbf{k})\, D_0(\omega, \mathbf{k})\, \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \frac{d\omega}{2\pi}\,, \tag{4.34}$$

где

$$G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{p}^2/2m + i\delta}\,, \qquad D_0(\omega, \mathbf{k}) = \frac{c^2\mathbf{k}^2}{\omega^2 - c^2\mathbf{k}^2 + i\delta}\,. \tag{4.35}$$

Интеграл по ω берем, замыкая контур в нижней полуплоскости:

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\tilde{\varepsilon} - \omega + i0}\, \frac{c^2k^2}{\omega^2 - c^2k^2 + i0}\, \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{i}{2}\, \frac{ck}{ck - \tilde{\varepsilon} - i0}\,, \tag{4.36}$$

где $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - (\mathbf{p} - \mathbf{k})^2/2m,\ k = |\mathbf{k}|$. Получаем

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2}{2} \int \frac{ck}{\varepsilon - ck - (\mathbf{p} - \mathbf{k})^2/2m + i0}\, \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,. \tag{4.37}$$

Часть интегрирования по d^3k можно выполнить точно, если воспользоваться известной заменой переменных ([1], § 21, п. 3) и перейти к интегрированию по $|\mathbf{k}|$ и $q = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|$. Обозначим через x косинус угла между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$, тогда $d^3k = 2\pi k^2\, dk\, dx$, а $q^2 = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2 = p^2 + k^2 - 2pkx$, и потому $q\, dq = -pk\, dx$. Получаем

$$\int f(|\mathbf{k}|, |\mathbf{p} - \mathbf{k}|) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \equiv \frac{1}{(2\pi)^2 p} \int k\, dk \int\limits_{|p-k|}^{p+k} f(k, q)\, q\, dq\,. \tag{4.38}$$

Это дает

$$\Sigma = \frac{g^2}{2(2\pi)^2 p}\int_0^{k_D} k\,dk \int_{|p-k|}^{p+k} \frac{ck\,q\,dq}{\varepsilon - q^2/2m - ck + i0}\,. \tag{4.39}$$

Интегрируем по $x = q^2$:

$$\Sigma = \frac{g^2 mc}{8\pi^2 p}\int_0^{k_D} \ln\left|\frac{\varepsilon-(p-k)^2/2m-ck}{\varepsilon-(p+k)^2/2m-ck}\right| k^2\,dk\ -$$

$$-i\,\frac{g^2 mc}{8\pi p}\int_0^{k_D} k^2\,dk \int_{(p-k)^2}^{(p+k)^2} \delta\left(x-2m(\varepsilon-ck)\right)\,dx\,. \tag{4.40}$$

При $p < mc$ собственно-энергетическая часть Σ вещественна, т. е. полярон стабилен. Эффекты, связанные с распадом полярона при $p > mc$, мы рассмотрим в следующей задаче.

Нас интересует Σ вблизи массовой поверхности $\varepsilon = p^2/2m$ и при малых p. При малом $p \ll mc$ вычисляем Σ, раскладывая по малым параметрам $\Delta = \varepsilon - p^2/2m$ и $v = p/m$:

$$\Sigma = \frac{g^2 mc}{8\pi^2 p}\int_0^{k_D} \ln\left|\frac{k^2/2m+(c-v)k-\Delta}{k^2/2m+(c+v)k-\Delta}\right| k^2\,dk\ \ = \frac{g^2 mc}{8\pi^2 p}\times$$

$$\times\int_0^{k_D}\left(-\frac{2vk}{ck+k^2/2m}-\frac{4\Delta vk}{2(ck+k^2/2m)^2}-\frac{2v^3k^3}{3(ck+k^2/2m)^3}+\ldots\right)k^2dk\,. \tag{4.41}$$

Три члена в скобках дают искомое разложение $\Sigma = \varepsilon_0 - \alpha_1\Delta - \alpha_2\,p^2/2m$, причем интегралы по k легко считаются, так как $c \ll k_D/m$, и поэтому ck в знаменателях пренебрежимо мало по сравнению с $k^2/2m$ почти во всей области интегрирования. Получаем

$$\varepsilon_0 = -\frac{g^2 c}{4\pi^2}\int_0^{k_D} \frac{k^3\,dk}{ck+k^2/2m} = -\frac{g^2 c k_D^2 m}{4\pi^2} \tag{4.42}$$

и, с логарифмической точностью,

$$\alpha_1 = \frac{g^2 m^2 c}{\pi^2}\int_0^{k_D}\frac{k^3\,dk}{(k^2+2mck)^2} = \frac{g^2m^2c}{\pi^2}\ln\frac{k_D}{mc}\,, \tag{4.43}$$

$$\alpha_2 = \frac{2g^2m^3c}{3\pi^2}\ \frac{2}{m}\ \int_0^{k_D}\frac{k^5\,dk}{(k^2+2mck)^3} = \frac{4g^2m^2c}{3\pi^2}\ln\frac{k_D}{mc} = \frac{4}{3}\alpha_1\,. \tag{4.44}$$

Дисперсионное соотношение дается уравнением $G_0^{-1} - \Sigma = 0$. Получаем перенормировку массы

$$\frac{m_*}{m} = \frac{1}{1-\alpha_2}\ > 1\,. \tag{4.45}$$

Обратим внимание на то, что электрон действительно «одевается», а не «раздевается» — поправка к массе положительна.

17a. *(Первое решение.)* Рассмотрим мнимую часть $\operatorname{Im}\Sigma$ — второе слагаемое в (4.40). Аргумент δ–функции попадает в область интегрирования, если

$$(p-k)^2 < 2m\left(\frac{p^2}{2m} - ck\right) < (p+k)^2\,, \qquad k, p > 0\,. \tag{4.46}$$

Это эквивалентно $0 < k < 2(p - mc)$, и поэтому мнимая часть отлична от нуля при $v = p/m > c$. Полная вероятность излучения фонона в единицу времени есть

$$2\gamma = -2\operatorname{Im}\Sigma = 2\frac{g^2 mc}{8\pi p}\int\limits_0^{2m(v-c)} k^2\,dk = \frac{2g^2m^3}{3\pi}\,\frac{c}{v}\,(v-c)^3\,. \tag{4.47}$$

Из ответа (4.47) видно, что излучение фонона происходит при $v > c$. Вероятность излучения уменьшается при $v \to c$ и оказывается равной нулю при $v < c$.

Теперь найдем распределение по углам. Рассмотрим выражение (4.47) и, вместо того, чтобы брать интеграл по k, выразим k через угол вылета фонона θ. Конечный импульс электрона $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{k}$, а значит $q^2 = k^2 + p^2 - 2pk\cos\theta$. Исключим q, пользуясь законом сохранения энергии $q^2/2m + ck = p^2/2m$. Находим

$$\cos\theta = (k + 2mc)/2p\,. \tag{4.48}$$

Перейдем от интегрирования по k к интегрированию по θ:

$$\begin{aligned}\operatorname{Im}\Sigma &= -\frac{g^2mc}{8\pi p}\int\limits_0^{2m(v-c)} k^2\,dk = \frac{g^2mc}{4\pi}\int\limits_0^{\theta_{\text{кр}}}\left[2p\cos\theta - 2mc\right]^2 d|\cos\theta| = \\ &= \frac{g^2(mc)^3}{\pi}\int\limits_0^{\theta_{\text{кр}}}\left(\frac{v}{c}\cos\theta - 1\right)^2\sin\theta\,d\theta\,,\end{aligned} \tag{4.49}$$

где $\theta_{\text{кр}} = \arccos\,(c/v)$ — предельное значение угла вылета фонона. Выражение в интеграле (4.49) дает угловое распределение интенсивности излучаемого звука внутри конуса с углом раствора $\theta_{\text{кр}}$.

17 a. *(Второе решение.)* Воспользуемся случаем, чтобы проиллюстрировать один весьма общий метод, следующий из теоремы унитарности. Он позволяет достаточно быстро находить мнимую часть любого заданного графика. В нашем случае распределение фононов по углам можно получить с помощью этого метода вообще без единого интегрирования.

Физический смысл $\operatorname{Im}\Sigma$ — обратное время распада на электрон и фонон. Продукты распада — реальные частицы, энергия и импульс каждой из них связаны дисперсионным соотношением. Поэтому для нахождения $\operatorname{Im}\Sigma$, достаточно в выражении (4.10) выделить вклад от массовой поверхности промежуточных частиц. Это достигается заменой:

$$G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) \longrightarrow \operatorname{Im} G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = -i\pi\,\delta(\varepsilon - \mathbf{p}^2/2m)\,; \tag{4.50}$$

$$D_0(\omega, \mathbf{k}) \longrightarrow \operatorname{Im} D_0(\omega, \mathbf{k}) = -i\frac{\pi}{2}\,\omega_0(\mathbf{k})\;(\delta(\omega - \omega_0(\mathbf{k})) + \delta(\omega + \omega_0(\mathbf{k})))\,. \tag{4.51}$$

Иначе говоря, распаду соответствует ситуация, когда промежуточные частицы не виртуальные, а реальные. Поэтому сразу пишем

$$i\operatorname{Im}\Sigma = ig^2\int \operatorname{Im} G_0(\varepsilon - \omega, \mathbf{p} - \mathbf{k})\;\operatorname{Im} D_0(\omega, \mathbf{k})\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d\omega}{2\pi}\,. \tag{4.52}$$

Слагаемое $\delta(\omega + \omega_0(\mathbf{k}))$ в $\operatorname{Im} D_0$ опускаем, поскольку оно отвечает поглощению фонона, а не испусканию. Получаем

$$-i\,\frac{\pi^2}{2}\,g^2\int \omega_0(\mathbf{k})\,\delta\left(\varepsilon - \omega - \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{k})^2}{2m}\right)\;\delta(\omega - \omega_0(\mathbf{k}))\;\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{d\omega}{2\pi}\,. \tag{4.53}$$

Одна δ-функция устраняет интеграл по ω:

$$-i\,\frac{\pi}{4}\,g^2\int \omega_0(k)\;\delta\left(\varepsilon - \omega_0(k) - \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{k})^2}{2m}\right)\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,. \tag{4.54}$$

Берем ε на массовой поверхности:

$$\operatorname{Im}\Sigma = -\frac{\pi}{4}g^2c\;\int\;\delta\left(\frac{k}{2m} + c - \frac{p}{m}\cos\theta\right)\frac{k^2dk}{(2\pi)^2}\;\sin\theta\,d\theta\,. \tag{4.55}$$

Вторая δ-функция устраняет интеграл по k, и мы вновь приходим к распределению (4.49).

17 б. Чтобы найти матричный элемент перехода, рассмотрим гамильтониан взаимодействия электрона с акустическими фононами:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int} = g\sum_{\mathbf{k}}\sqrt{ck/2V}\left[b_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr}-\omega_0(\mathbf{k})t)} + b^+_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{kr}-\omega_0(\mathbf{k})t)}\right] \tag{4.56}$$

(см. (6.6)). Здесь $\omega_0(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$, $\mathbf{r}$ — координата электрона, V — объем системы, а сумма по $\mathbf{k}$, в соответствии с моделью Дебая, ограничена $|\mathbf{k}| < k_D$. Находим вероятность распада, пользуясь «золотым правилом»:

$$dW_{\rm i\to f} = (2\pi/\hbar)\,|\langle \mathrm{f}|\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}|\mathrm{i}\rangle|^2\,\delta(E_{\rm f} - E_{\rm i})\;d\nu_{\rm f}\,. \tag{4.57}$$

В начальном состоянии импульс электрона $\mathbf{p}$, в конечном имеются электрон и фонон с импульсами $\mathbf{q}$ и $\mathbf{k}$ соответственно. Находим матричный элемент

$$\langle \mathrm{f}|\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}|\mathrm{i}\rangle = \sqrt{ck/2V}\;\delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{k})\,. \tag{4.58}$$

Возводя его в квадрат, учтем что, согласно известному правилу, квадрат δ-функции записывается так:

$$\left(\delta^{(3)}(\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k})\right)^2 = (2\pi)^3 V\,\delta^{(3)}\left(\mathbf{p}-\mathbf{q}-\mathbf{k}\right)\,. \tag{4.59}$$

Вероятность перехода $dW_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}$ есть:

$$(2\pi)^3 V\,\delta^{(3)}(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{p})\ \frac{g^2 ck}{2V}\ 2\pi\ \delta\left(ck + q^2/2m - p^2/2m\right)\frac{d^3q\,d^3k}{(2\pi)^6}\,. \tag{4.60}$$

Интегрируем по q и переходим к новым переменным: длине вектора k и углу θ. Получается

$$\begin{aligned} dW_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}} &= \frac{g^2ck}{8\pi^2}\delta\left(ck + (p-k)^2/2m - p^2/2m\right)\,d^3k \\ &= \frac{mg^2ck^2}{2\pi}\delta\left(k - 2m(v\cos\theta - c)\right)\,d(\cos\theta)\,dk\,. \end{aligned} \tag{4.61}$$

Интегрируем по k:

$$dW_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}} = \frac{2}{\pi}g^2m^3(v\cos\theta - c)^2\,\sin\theta\,d\theta\,. \tag{4.62}$$

Это выражение отличается от (4.49) множителем 2, что в точности соответствует связи времени жизни τ с затуханием γ: $\tau^{-1} = 2\gamma$.

18. Диаграммы для запаздывающего взаимодействия двух частиц нетрудно получить из S-матрицы:

$$\mathrm{T}_1\mathrm{T}_2\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int\!\!\int \psi^+(x_1)\,\psi(x_1)\,U(x_1-x_2)\,\psi^+(x_2)\,\psi(x_2)\right]d^4x_1\,d^4x_2\,, \tag{4.63}$$

где $x = (t, \mathbf{r})$. Хронологическое упорядочение мы обозначили через $\mathrm{T}_1\mathrm{T}_2$, чтобы лишний раз подчеркнуть, что частицы различны. В импульсном представлении взаимодействие имеет вид

$$(2\pi)^4\int \psi^+_{p_1}\psi_{p_3}\psi^+_{p_2}\psi_{p_4}\,U(k)\,\delta(p_1-p_3+k)\,\delta(p_2-p_4-k)\,d^4k\,. \tag{4.64}$$

Вершину Γ определяем, как обычно, через двухчастичную функцию Грина:

$$\begin{aligned} &K_{12,34} = (2\pi)^8\delta_{p_1,p_3}\delta_{p_2,p_4}G_0^{(1)}(p_1)G_0^{(2)}(p_2)\ +\ G_0^{(1)}(p_1)G_0^{(2)}(p_2)\ \times \\ &\times G_0^{(1)}(p_3)G_0^{(2)}(p_4)\ i\,\Gamma_{p_1,p_2,p_3,p_4}(2\pi)^4\delta_{p_1+p_2,p_3+p_4}\,. \end{aligned} \tag{4.65}$$

Разлагая S-матрицу в ряд, получаем графики для Γ, показанные на рис. 4.7. Переставляем члены ряда, выделяя сумму графиков, дающую неприводимую вершинную часть Γ^0. Затем действуем точно так же, как при выводе интегрального уравнения для амплитуды рассеяния F в задаче 11. Получаем уравнение Бете–Солпитера:

$$\Gamma_{1,2,3,4} = \Gamma^0_{1,2,3,4} + i\int\Gamma^0_{1,2,1+,2-}G_0(p_{1+})\,G_0(p_{2-})\Gamma_{1+,2-,3,4}\frac{d^4k}{(2\pi)^4}\,. \tag{4.66}$$

а) Если нет запаздывания, линия взаимодействия не зависит от переданной частоты: $U(\omega, \mathbf{k}) = U(\mathbf{k})$. Рассмотрим поправки к Γ второго порядка (рис. 4.11).

Рис. 4.11

В первом графике интеграл по частотам дает нуль:

$$\int G_0^{(1)}(\varepsilon_1 - \omega) G_0^{(2)}(\varepsilon_2 - \omega)\, d\omega = \int \frac{d\omega}{(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)} = 0\,, \tag{4.67}$$

поскольку оба полюса подинтегрального выражения:

$$\omega_1 = \varepsilon_1 - p_{1+}^2/2m_1 + i\delta\,, \quad \omega_2 = \varepsilon_2 - p_{2-}^2/2m_2 + i\delta\,, \tag{4.68}$$

лежат в верхней полуплоскости. Нетрудно видеть, что по этой же причине обращается в нуль любой график более высокого порядка с пересекающимися линиями взаимодействия.

Отсутствие вклада графиков с пересекающимися линиями взаимодействия становится еще более очевидным во временном представлении, поскольку $G_0(t, \mathbf{r}) = 0$ при $t < 0$ в силу причинности. Например, первому графику рис. 4.9 соответствует выражение:

$$\int\!\!\int U(\mathbf{r}_{12}) U(\mathbf{r}_{34}) G_0^{(1)}(t_2 - t_1, \mathbf{r}_{42}) G_0^{(2)}(t_1 - t_2, \mathbf{r}_{31})\, dt_2\, d^3 r_4\,, \tag{4.69}$$

тождественно равное нулю при всех t_1, t_2 (обозначение: $\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b$).

Второй график отличен от нуля, поскольку входящие в него функции Грина имеют полюсы по разные стороны от вещественной оси. Однако этот график не входит в Γ^0, поскольку он приводим: вертикальной линией его можно разрезать на два графика первого порядка.

Итак,

$$\Gamma^0_{p_1, p_2, p_1+q, p_2-q} = U(\mathbf{q}) \tag{4.70}$$

Подставив это выражение в уравнение Бете–Солпитера, замечаем, что если Γ^0 не зависит от переданной частоты, то и Γ обладает тем же свойством. Следовательно, вся зависимость от частоты определяется функциями Грина промежуточных состояний $G^{(1)}$ и $G^{(2)}$, а поэтому интегрирование по частоте точно такое же, как для второго графика на рис. 4.9:

$$i \int G_0^{(1)}(\varepsilon_1 - \omega) G_0^{(2)}(\varepsilon_2 + \omega) \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - p_{1+}^2/2m_1 - p_{2-}^2/2m_2 + i0}\,, \tag{4.71}$$

где $p_{i\pm} = p_i \pm k$. Преобразуем знаменатель, разделив кинетическую энергию на энергию центра масс и энергию относительного движения:

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}'^2}{2m_2} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_{\text{отн}}^2}{2\mu}\,, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p} + \mathbf{p}', \quad \mathbf{p}_{\text{отн}} = \frac{m_2\mathbf{p} - m_1\mathbf{p}'}{m_1 + m_2}\,. \tag{4.72}$$

Для $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{1+} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}$, $\mathbf{p}' = \mathbf{p}_{2-} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}$ эти тождества дают

$$\frac{\mathbf{p}_{1+}^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_{2-}^2}{2m_2} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{q}^2}{2\mu}\,, \tag{4.73}$$

и мы получаем ядро интегрального уравнения (4.26).

б) Порядок графика по τ проще всего найти во временном представлении. Рассмотрим вклад в Γ^0, содержащий N пересекающихся линий взаимодействия. Интегрирование по временам производится по $(2N-1)$-мерной области в координатах

$$\tau_1 = t_2 - t_1, \quad \tau_2 = t_3 - t_1, \quad \ldots, \quad \tau_{2N-1} = t_{2N} - t_1\,. \tag{4.74}$$

По последней ($(2N-1)$-й) временной координате нет необходимости интегрировать в силу трансляционной симметрии во времени. При этом величина области интегрирования по каждому из $(2N-1)$ времен порядка τ.

Следовательно, степень τ можно оценить как $\tau^{(2N-1)+(-N)} = \tau^{N-1}$. Первое слагаемое в степени возникает от $(2N-1)$-кратного интегрирования, а второе — из-за нормировки потенциала. Получается, что степень по τ вклада N-го порядка в Γ^0 определяется *только* количеством линий взаимодействия и не зависит от того, как именно они пересекаются.

Подчеркнем, что данная оценка эффективной величины области интегрирования по времени верна только в случае, когда никаким сечением график нельзя разбить на два вклада в Γ^0 более низкого порядка. Поэтому оценка τ^{N-1} для величины вклада N-го порядка в Γ^0 подразумевает неприводимость диаграммы.

Распространим полученный результат на графики, дающие полную амплитуду рассеяния Γ. Степень τ для таких графиков зависит не только от числа линий взаимодействия N, но и от количества двухчастичных сечений M. Модифицируя оценки, приведенные выше, находим: τ^{N-M-1}.

19. Найдем закон преобразования фурье-компоненты взаимодействия при переходе в движущуюся систему отсчета. Будем считать, что частицы, передающие взаимодействие, — нерелятивистские, и значит, можно пользоваться преобразованием Галилея $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$, $t' = t$. Переходя в систему отсчета, движущуюся со скоростью v вдоль оси x, получаем

$$U_v(\mathbf{q}, \omega) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r} + i\omega t} U(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, t)\, d^3r\, dt = U(\mathbf{q}, \omega - vq_x)\,. \tag{4.75}$$

Для взаимодействия $U(r,t) = \Big(U(r)/2\tau\Big)\, e^{-|t|/\tau}$ находим

$$U_v(q, \omega) = \frac{U(q)}{1 + \tau^2(\omega - vq_x)^2}\,. \tag{4.76}$$

При рассмотрении сдвига энергии, вызванного движением, порядок действий будет следующим. Сначала мы перейдем в систему центра масс, движущуюся со скоростью $v = P/M$, а затем положим $\omega = 0$, что соответствует пределу взаимодействия без запаздывания. Преобразование (4.75) даст поправку к потенциалу, возникающую из-за движения. Зная ее, можно найти сдвиг энергии основного состояния для относительного движения. А этот сдвиг, в свою очередь, и определяет поправку к массе. Как мы увидим, такой метод является корректным, если $\tau \ll \hbar/\varepsilon_0$, где ε_0 — энергия связи.

Может показаться, что пренебрегать в (4.76) зависимостью от ω, сохраняя при этом зависимость от v, не вполне правильно, поскольку и та и другая зависимости имеют одинаковую малость по τ. На самом деле наши действия оправданы, и проще всего в этом убедиться можно следующим способом. Запишем формально скорость как $v = \lambda/\tau$, и будем считать параметром разложения λ, а не v. При этом в выражении (4.76) уже можно перейти к пределу $\tau = 0$, не нарушив при этом зависимости от λ:

$$U_v(\mathbf{q}, \omega) = \frac{U(\mathbf{q})}{1 + (\tau\omega - \lambda q_x)^2} \approx U(\mathbf{q}) - \lambda^2 q_x^2 U(\mathbf{q}) + O(\lambda^4)\,. \tag{4.77}$$

Пренебрежение $\omega\tau$ оправдано, поскольку частота ω в уравнении Бете–Солпитера (4.20) оказывается порядка энергии связи ε_0, а с другой стороны, $\tau \ll \hbar/\varepsilon_0$.

Полученное в результате приближения (4.77) взаимодействие не зависит от частоты, и, согласно задаче 18 а, уравнение для вершинной части принимает вид

$$\widehat{\Gamma}_P = \widehat{U} + \widehat{U}\widehat{G}_0\widehat{\Gamma}_P\,. \tag{4.78}$$

Здесь $\widehat{\Gamma}_P$, $\widehat{U}$ и $\widehat{G}_0$ — операторы, действующие на состояние частицы массы $m/2$ в поле U, а функция Грина $\widehat{G}_0 = 1/(\Omega_0 - q^2/m + i0)$. Полная функция Грина, записанная в операторном виде, есть

$$\widehat{G} = \widehat{G}_0 + \widehat{G}_0\widehat{\Gamma}_P\widehat{G}_0 = \frac{1}{\Omega_0 - \left(\widehat{q}^2/m + \widehat{U}_v\right) + i0}\,. \tag{4.79}$$

Взяв основное состояние $|0_v\rangle$ уравнения Шредингера с потенциалом U_v (4.77) и массой $m/2$, находим закон дисперсии:

$$\Omega_0 = \langle 0_v|\, \frac{\widehat{q}^2}{m} + \widehat{U}_v\, |0_v\rangle\,. \tag{4.80}$$

Для первой поправки к уровню энергии достаточно взять матричный элемент по невозмущенному состоянию $|0_v\rangle_{v=0}$. Подставляя $\Omega_0 = \Omega - P^2/4m$, а вместо U_v — фурье-образ выражения (4.77), получаем

$$\Omega = \varepsilon_0 + \frac{P^2}{2M} - \tau^2 v^2 \langle 0|\, q_x^2\, U(q)|0\rangle\,. \tag{4.81}$$

Для центрально-симметричного взаимодействия $U(\mathbf{q}) = U(|\mathbf{q}|)$ основное состояние тоже симметрично, и можно усреднить q_x^2 по направлениям:

$$\langle q_x^2 \rangle = q^2/3\,. \tag{4.82}$$

Заменяем v на $P/2m$ и q^2 на $-\nabla^2$:

$$\Omega = \varepsilon_0 + P^2 \left(\frac{1}{4m} + \frac{\tau^2}{12m^2} \langle 0|\, \nabla^2 U\, |0\rangle_0 \right)\,. \tag{4.83}$$

Таким образом, эффективная масса есть

$$M = \left(\frac{1}{2m} + \frac{\tau^2}{6m^2} \langle 0|\, \nabla^2 U\, |0\rangle_0 \right)^{-1} \approx 2m - (2\tau^2/3) \langle 0| \nabla^2 U |0\rangle_0\,. \tag{4.84}$$

То что запаздывание приводит к уменьшению эффективной массы, можно понять так. В движущейся системе взаимодействие «отстает» от частиц, и эффективно уменьшается. Потенциальная яма становится более мелкой и уровень выталкивается вверх. Поэтому оба эффекта, возникающих вследствие движения, — кинетическая энергия центра масс и выталкивание уровня из-за ослабления потенциала, имеют одинаковый знак.

В действительности, задачу можно решить вообще без диаграмм. Из-за запаздывания частица «видит» вторую частицу не в точке $\mathbf{r}$, а в точке $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$. Поэтому эффективный потенциал, действующий на нее, несколько отличается от $U(r)$. Поправку к потенциалу, малую при $v\tau \ll r_0$, где r_0 — размер волновой функции связанного состояния, нетрудно найти, разлагая $U(|\mathbf{r} - \mathbf{v}t|)$ в ряд по малому t. При этом вклад от члена разложения первого порядка сокращается при интегрировании по углам, и необходимо рассмотреть второй член разложения:

$$\delta U(r) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial r_\alpha \partial r_\beta} v_\alpha v_\beta t^2\,. \tag{4.85}$$

Усредняя это выражение по t (по распределению $(2\tau)^{-1} \exp(-|t|/\tau)$) и по $\mathbf{r}$ (по распределению $|\psi(r)|^2$), снова получаем (4.83).

Интересно сравнить результат (4.83) с массой полярона, которая всегда больше массы электрона. В обоих случаях изменение массы происходит благодаря запаздыванию взаимодействия. Разные знаки поправки к массе отвечают разной физике. В случае полярона, состояние, о массе которого идет речь, существует и без взаимодействия. Связанное же состояние двух частиц само возникает благодаря тому самому взаимодействию, которое перенормирует массу.

20. Перейдем в фурье-представление и, согласно (1.36), запишем гамильтониан в виде $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}$, где

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 = \int\limits_{-\pi}^{\pi} \varepsilon_q\, a_q^+ a_q\, \tfrac{dq}{2\pi}\,, \qquad \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int} = \int\limits_{-\pi}^{\pi} iJ_2 \sin q\, (a_{-q} a_q + a_{-q}^+ a_q^+)\, \tfrac{dq}{2\pi}\,, \tag{4.86}$$

где $\varepsilon_q = 2(J_1 \cos q - B)$. Функция Грина «невозмущенной» задачи:

$$G_0(\varepsilon, q) = 1/(\varepsilon - \varepsilon_q + i\delta \operatorname{sign} \varepsilon)\,. \tag{4.87}$$

В соответствии со структурой $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$, в диаграммной технике есть две вершины «взаимодействия», сопряженные друг другу (рис. 4.12).

Рис. 4.12

Этим двум вершинам соответствуют выражения $2iJ_2 \sin q$ и $-2iJ_2 \sin q$ соответственно. Поправки к функции Грина, вычисленные по теории возмущений, имеют вид, показанный на рис. 4.13. Обратим внимание на то, что знаки ε чередуются. Так получается потому, что по правилу сохранения 4-импульса в вершине, сумма ε_α всех входящих линий равна сумме $\varepsilon_{\alpha'}$ выходящих линий, если они есть, или нулю, если выходящих линий нет. То же самое справедливо для импульсов.

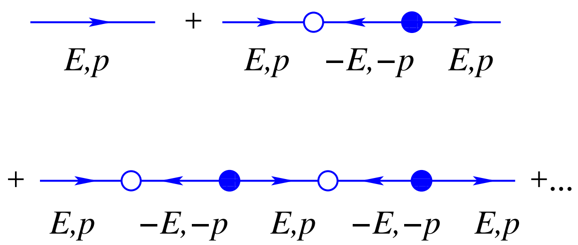


Рис. 4.13

Из-за чередования знаков отличны от нуля только поправки четного порядка, причем в каждом порядке $2n$ имеется всего один график. Этому графику соответствует выражение

$$(-4J_2^2 \sin^2 q)^n \, G_0^{n+1}(\varepsilon, q) G_0^n(-\varepsilon, -q)\,. \tag{4.88}$$

Сумма по n представляет собой геометрическую прогрессию. Получаем

$$\begin{aligned} G(\varepsilon, q) &= \frac{G_0(\varepsilon, q)}{1 + 4J_2^2 \sin^2 q G_0(\varepsilon, q) G_0(-\varepsilon, -q)} \\ &= \frac{\varepsilon + 2(J_1 \cos q - B)}{\varepsilon^2 - 4((J_1 \cos q - B)^2 + J_2^2 \sin^2 q) + i\delta}\,. \end{aligned} \tag{4.89}$$

Спектр определяется полюсами: $\varepsilon = \pm 2\sqrt{(J_1 \cos q - B)^2 + J_2^2 \sin^2 q}$. Знак мнимой части $i\delta$ в (4.89) указывает, что верхняя ветвь соответствует пустым состояниям, а нижняя — заполненным.

21 а. Эффективное взаимодействие может быть выражено через двухчастичную функцию Грина фермионов:

$$\Pi(\omega, \mathbf{r}) = 2i \int G(\varepsilon_+, \mathbf{r}) G(\varepsilon_-, \mathbf{r}) \tfrac{d\varepsilon}{2\pi}\,, \qquad \varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \omega/2\,. \tag{4.90}$$

Функция Грина в координатно-частотном представлении,

$$G(\varepsilon, \mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi|\mathbf{r}|} e^{i\,\mathrm{sign}\,\varepsilon\,\varkappa(\varepsilon)|\mathbf{r}|}\,, \qquad \varkappa(\varepsilon) = (p_0^2 + 2m\varepsilon)^{1/2} \tag{4.91}$$

была найдена в решении задачи 22 (см. (5.25)), а множитель 2 в (4.90) возникает из-за спинового вырождения.

Выражение (4.90) есть не что иное как поляризационный оператор ферми-газа $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ в координатно-частотном представлении. Поляризационный оператор $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ будет найден в задаче 24 а при малых $\omega \ll E_F$ и $|\mathbf{k}| \ll p_0$ (см. выражение (5.39)). Однако, хотя характерная энергия отдачи при рассеянии тяжелой частицы на фермионах оказывается много меньше E_F, характерный переданный импульс может оказаться порядка p_0. Поэтому нам потребуется более общее выражение для $\Pi(\omega, \mathbf{k})$, справедливое при малых $\omega \ll E_F$ и произвольных $\mathbf{k}$. В принципе для отыскания $\Pi(\omega, \mathbf{r})$ можно было бы воспользоваться точным выражением (8.53) для $\Pi(\omega, \mathbf{k})$, которое будет получено в задаче 44, однако оказывается более удобным перейти к пределу $\omega \ll E_F$ непосредственно в выражении (4.90).

Чтобы установить связь между эффективным взаимодействием $V_{\rm eff}(\omega, \mathbf{r})$ и поляризационным оператором, обратим внимание на роль частотной дисперсии $V_{\rm eff}(\omega, \mathbf{r})$. Как было выяснено в задаче 18, в отсутствие частотной дисперсии (т. е. для мгновенного взаимодействия) все диаграммы с замкнутыми петлями обращаются в нуль в силу аналитических свойств функции Грина частицы, выражающих принцип причинности. Поэтому в отсутствие частотной дисперсии все поправки к функции Грина частицы тождественно равны нулю. Принимая во внимание это обстоятельство, а также то, что нас интересуют малые переданные частоты $\omega \ll E_F$, оказывается удобным явно выделить зависящую от ω часть поляризационного оператора (4.90). В результате эффективное взаимодействие может быть записано следующим образом:

$$V_{\rm eff}(\omega, \mathbf{r}) = \lambda^2 \left(\Pi(\omega, \mathbf{r}) - \Pi(\omega = 0, \mathbf{r}) \right)\,. \tag{4.92}$$

Величина $\varkappa(\varepsilon)$ в интересующей нас области $|\varepsilon| \ll E_F$ практически постоянна, поэтому заменим $\varkappa(\varepsilon)$ в (4.91) на $\varkappa(\varepsilon = 0) = p_0$. Интеграл по ε в (4.90) после этого вычисляется элементарно:

$$V_{\rm eff}(\omega, \mathbf{r}) = 2i\lambda^2 \int \frac{m^2 \sin^2 p_0|\mathbf{r}|\,(\mathrm{sign}\,\varepsilon_+\ \mathrm{sign}\,\varepsilon_- - 1)}{(2\pi)^2 \mathbf{r}^2} \frac{d\varepsilon}{2\pi} = -i|\omega| F(\mathbf{r})\,, \tag{4.93}$$

$$F(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^2 m^2}{2\pi^3 \mathbf{r}^2} \sin^2(p_0|\mathbf{r}|)\,. \tag{4.94}$$

Обратим внимание на то, что найденное выражение для $V_{\rm eff}(\omega, \mathbf{k})$ есть произведение функций ω и $\mathbf{r}$. Такая факторизация справедлива лишь в пределе $|\omega| \ll E_F$ и не имеет места для точного поляризационного оператора (8.53).

Перейдем в импульсное представление:

$$V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k}) = -i|\omega| \int F(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{kr}} d^3\mathbf{r} = -i|\omega| \widetilde{F}(\mathbf{k}) \tag{4.95}$$

Интеграл по $d^3\mathbf{r}$ нетрудно вычислить [2] в полярных координатах:

$$\widetilde{F}(\mathbf{k}) = \frac{8\pi\lambda^2 m^2}{2\pi^3|\mathbf{k}|} \int\limits_0^\infty \sin^2(p_0 r)\sin(|\mathbf{k}|r)\frac{dr}{r} = \frac{1}{\pi}\lambda^2 m^2 \begin{cases} |\mathbf{k}|^{-1} & \text{при } |\mathbf{k}| \leqslant 2p_0, \\ 0 & \text{при } |\mathbf{k}| > 2p_0. \end{cases} \tag{4.96}$$

Отсечка при $|\mathbf{k}| = 2p_0$ в полученном выражении (4.96) означает, что при рассеянии с малой передачей энергии переданный импульс не может быть больше диаметра ферми-сферы $2p_0$.

21 б. Рассмотрим собственно-энергетическую часть функции Грина тяжелой частицы:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = i \int G_0(\varepsilon - \omega, \mathbf{p} - \mathbf{k})\, V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k}) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi}\,, \tag{4.98}$$

где

$$G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon - \mathbf{p}^2/2M + i\delta}\,, \qquad V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k}) = -i|\omega|\widetilde{F}(\mathbf{k})\,. \tag{4.99}$$

Поскольку $V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k}) \propto |\omega|$, интеграл по ω в (4.98) формально расходится. Эта расходимость есть следствие приближенного характера нашего выражения (4.95) для V_{eff}, справедливого лишь при $|\omega| \ll E_F$. Регуляризуем интеграл по ω, улучшив его сходимость за пределами области $-\omega_0 < \omega < \omega_0$, где $\omega_0 \approx E_F$. Такая регуляризация требует некоторой осторожности, поскольку взаимодействие $V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k})$ должно удовлетворять общим требованиям аналитичности по ω. Так, при аналитическом продолжении с полуоси $\omega > 0$ должно получаться запаздывающее взаимодействие (аналитичное в верхней полуплоскости $\operatorname{Im}\omega > 0$), а при продолжении с полуоси $\omega < 0$ — опережающее взаимодействие (аналитичное в нижней полуплоскости $\operatorname{Im}\omega < 0$). Требуемым условиям аналитичности можно удовлетворить, например, регуляризовав выражение для $V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k})$ следующим образом:

$$V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k}) = -i|\omega| \left(\frac{i\omega_0}{i\omega_0 + |\omega|}\right)^n \widetilde{F}(\mathbf{k})\,, \tag{4.100}$$

где n — достаточно большое положительное число.

Теперь проинтегрируем выражение (4.98) по ω. Заметим, что если бы функция $V_{\text{eff}}(\omega, \mathbf{k})$ была аналитична в полуплоскости $\operatorname{Im}\omega < 0$, то интеграл был бы равен нулю

[2] При интегрировании по $r = |\mathbf{r}|$ в (4.96) использован интеграл

$$\int\limits_0^\infty \sin^2(\alpha r)\sin(\beta r)\frac{dr}{r} = \frac{\pi}{8}\left(2\operatorname{sign}\beta - \operatorname{sign}(\beta + 2\alpha) - \operatorname{sign}(\beta - 2\alpha)\right) \tag{4.97}$$

по теореме Коши. Поэтому удобно вычесть из интеграла (4.98) такое же выражение, в котором функция $V_{\text{eff}}(\omega,\mathbf{k})$ при $\omega>0$ заменена на результат аналитического продолжения с полуоси $\omega<0$. Действуя таким образом, получаем

$$\Sigma(\varepsilon,\mathbf{p})=\int A(\varepsilon,\mathbf{p}-\mathbf{k})\widetilde{F}(\mathbf{k})\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,, \tag{4.101}$$

где

$$A(\varepsilon,\mathbf{p})=-\frac{1}{\pi}\int\limits_0^{\omega_0}\frac{\omega d\omega}{T_{\varepsilon,\mathbf{p}}+\omega}=\frac{T_{\varepsilon,\mathbf{p}}}{\pi}\ln\left(\frac{\omega_0+T_{\varepsilon,\mathbf{p}}}{T_{\varepsilon,\mathbf{p}}}\right)-\frac{\omega_0}{\pi}\,,\qquad T_{\varepsilon,\mathbf{p}}=\frac{\mathbf{p}^2}{2M}-\varepsilon-i\delta\,. \tag{4.102}$$

(При интегрировании по $\omega>0$ мы обрезали интеграл на $\omega=\omega_0$, воспользовавшись быстрым убыванием подинтегрального выражения в (4.100) при $\omega\gg\omega_0$.) Заметим, что вторым слагаемым $-\omega_0/\pi$ в выражении (4.102) для $A(\varepsilon,\mathbf{p})$ можно пренебречь, поскольку его вклад в $\Sigma(\varepsilon,\mathbf{p})$ сводится к константе, дающей поправку к химическому потенциалу частицы из-за взаимодействия с ферми-газом. Кроме того, под знаком логарифма в (4.102) можно пренебречь $T_{\varepsilon,\mathbf{p}}$ по сравнению с ω_0.

Интеграл по $d^3\mathbf{k}$ в выражении (4.101) можно вычислить следующим образом. Перейдем к переменным $k=|\mathbf{k}|$ и $q=|\mathbf{p}-\mathbf{k}|$ по формуле (4.38):

$$\Sigma(\varepsilon,\mathbf{p})=\frac{1}{(2\pi)^2p}\int\limits_0^{\infty}kdk\int\limits_{|p-k|}^{p+k}\widetilde{F}(k)\frac{T_{\varepsilon,q}}{\pi}\ln\left(\frac{\omega_0}{T_{\varepsilon,q}}\right)qdq\,. \tag{4.103}$$

Интегрирование по области $|p-k|<q<p+k$ дает

$$B_{\varepsilon,p}(k)=\frac{M}{4\pi}x^2\left[1+2\ln\left(\omega_0/x\right)\right]\Big|_{x_-}^{x_+}\,,\qquad x_\pm=\frac{(p\pm k)^2}{2M}-\varepsilon-i\delta\,. \tag{4.104}$$

С учетом (4.96) получается следующее выражение:

$$\Sigma(\varepsilon,\mathbf{p})=\frac{1}{(2\pi)^2p}\int\limits_0^{\infty}B_{\varepsilon,p}(k)\widetilde{F}(k)kdk=\frac{\lambda^2m^2}{\pi(2\pi)^2p}\int\limits_0^{2p_0}B_{\varepsilon,p}(k)dk \tag{4.105}$$

Интегрирование в (4.105) элементарно. Однако получающееся выражение весьма громоздко и мы не будем его выписывать.

Рассмотрим собственно-энергетическую часть $\Sigma(\varepsilon,\mathbf{p})$ отдельно при энергиях частицы ε больших и малых по сравнению с $\varepsilon_M=2p_0^2/M$. Для нахождения асимптотик явное выражение (4.105) оказывается не очень удобным. Более простой путь — вернуться к выражениям (4.101), (4.102) и выполнить разложение:

$$A(\varepsilon,\mathbf{p}-\mathbf{k})=\frac{1}{\pi}T_{\varepsilon,\mathbf{p}}\begin{cases}\ln\left(2M\omega_0/\mathbf{k}^2\right)+1 & \text{при } |\mathbf{p}|\ll|\mathbf{k}|\,,\\ \ln\left(\omega_0/T_{\varepsilon,\mathbf{p}}\right) & \text{при } |\mathbf{p}|\gg|\mathbf{k}|\,,\end{cases} \tag{4.106}$$

где во всех случаях подразумевается, что $\varepsilon \approx \mathbf{p}^2/2M$, поскольку нас интересует окрестность массовой поверхности частицы. В разложении (4.106) мы опустили независящие от ε и $\mathbf{p}$ члены, поскольку они дают лишь несущественный сдвиг химического потенциала частицы, а также члены пропорциональные $\mathbf{pk}$, поскольку они обращаются в нуль при интегрировании в (4.101).

Нас интересует область не слишком больших энергий $\varepsilon \ll \omega_0 \approx E_F$. В этой области логарифм в выражении (4.106) оказывается большим, и поэтому собственно-энергетическую часть (4.101) достаточно вычислить с логарифмической точностью:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \alpha T_{\varepsilon,\mathbf{p}} \begin{cases} \ln(\omega_0/\varepsilon_M) & \text{при } \varepsilon \ll \varepsilon_M\,, \\ \ln(\omega_0/T_{\varepsilon,\mathbf{p}}) & \text{при } \varepsilon_M \ll \varepsilon \ll \omega_0\,, \end{cases}, \tag{4.107}$$

где $\alpha = \frac{1}{\pi} F_{\mathbf{r}=0} = \lambda^2 m^2 p_0^2/(2\pi^4)$. Поскольку $T_{\varepsilon,\mathbf{p}} = -G^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p})$, перенормированная функция Грина

$$\widetilde{G}(\varepsilon, \mathbf{p}) = 1/(\varepsilon - \mathbf{p}^2/2M - \Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})) \tag{4.108}$$

имеет полюс при $\varepsilon = \mathbf{p}^2/2M$. Получается, что взаимодействие с ферми-газом никак не влияет на закон дисперсии тяжелой частицы. Иными словами, найденная собственно-энергетическая часть дает только перенормировку вычета a в разложении $G(\varepsilon, \mathbf{p}) = a/(\varepsilon - \mathbf{p}^2/2M + i\delta)$ вблизи полюса.

Обсудим перенормировку вычета a более подробно. Как следует из (4.107), поправка к вычету имеет порядок величины $\alpha \ln(\omega_0/\varepsilon_M)$. А поскольку $\varepsilon_M \ll \omega_0$, то даже при малом α эта перенормировка может быть весьма большой. Представляет интерес рассмотреть задачу при

$$\alpha \ll 1, \quad \alpha \ln(\omega_0/\varepsilon_M) \gg 1\,. \tag{4.109}$$

В этой области, с одной стороны, все еще можно пользоваться теорией возмущений по малому α, а с другой стороны — перенормировка функции Грина оказывается весьма сильной.

Чтобы найти функцию Грина, воспользуемся приемом, носящим название *метода ренормгруппы* (см. задачу 13). Рассмотрим как функция Грина $G(\varepsilon, \mathbf{p})$ зависит от параметра ультрафиолетовой обрезки ω_0. Зная эту зависимость, можно восстановить зависимость G от ε и $\mathbf{p}$, поскольку вся зависимость от ω_0 может быть выражена через безразмерный параметр $\omega_0/T_{\varepsilon,\mathbf{p}}$. Чтобы получить зависимость от ω_0 полезно рассмотреть производную $\partial G/\partial\omega_0$ и вычислить ее, дифференцируя по отдельности члены диаграммного ряда для G. (Ход рассуждений при этом напоминает решение задачи 13.) В низшем порядке по константе связи λ уравнение ренормгруппы имеет следующий вид:

$$\frac{\partial G(\varepsilon, \mathbf{p})}{\partial\omega_0} = G^2(\varepsilon, \mathbf{p}) \frac{\partial\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})}{\partial\omega_0} = \frac{\alpha}{\omega_0} G(\varepsilon, \mathbf{p})\,. \tag{4.110}$$

В уравнении (4.110) мы использовали выражение (4.107) в области $\varepsilon_M \ll \varepsilon \ll \omega_0$. Решая уравнение $\partial \ln G/\partial\omega_0 = \alpha/\omega_0$, получаем степенную зависимость $G \propto \omega_0^\alpha$. Отсюда получаем, что зависимость функции Грина от ε и $\mathbf{p}$ имеет степенную форму (4.33), причем коффициент a_0 в (4.33) есть ω_0^α.

Ренормгруппу в задачах такого типа, вообще говоря, следует применять более аккуратно, учитывая наряду с поправками к функции Грина также и поправки к вершине взаимодействия. Приведем для знатоков соответствующее вычисление.

Эатравочные функция Грина и вершина взаимодействия есть $G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = 1/(\varepsilon - \mathbf{p}^2/2M + i\delta)$ и $\Gamma^0 = \lambda$. Запишем перенормированные величины в виде

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) = Z(\xi)\, G_0(\varepsilon, \mathbf{p})\,, \quad \Gamma(\xi) = g(\xi)\,\lambda\,, \tag{4.111}$$

где функции Z и g, зависящие от $\xi = \ln(\omega_0/\varepsilon)$, описывают ренормировку в результате интегрирования по степеням свободы с энергиями $\varepsilon < E < \omega_0$. При этом уравнение (4.110) перепишется так:

$$\partial Z/\partial \xi = \alpha Z^3 g^2 \tag{4.112}$$

($\alpha = \lambda^2 m^2 p_0^2/2\pi^4$, как и выше). Теперь необходимо замкнуть систему уравнений, добавив уравнение ренормгруппы для $g(\xi)$. Поправка к вершинной части $\Gamma^0 = \lambda$ в низшем порядке по взаимодействию дается диаграммой, показанной на рис. 6.2. Эта диаграмма содержит логарифмическую расходимость:

$$\delta\Gamma = -\alpha\lambda \ln(\omega_0/\varepsilon) \qquad (\varepsilon \gg \varepsilon_M)\,. \tag{4.113}$$

С учетом вида перенормированных величин (4.111) получаем уравнение ренормгруппы для взаимодействия:

$$\partial g/\partial \xi = -\alpha Z^2 g^3\,. \tag{4.114}$$

Решим теперь систему уравнений (4.112), (4.114) с начальным условием $Z(0) = g(0) = 1$. Нетрудно проверить, что эти уравнения оставляют инвариантной величину Zg. Поэтому $g = 1/Z$ при всех ξ.

Это позволяет переписать уравнение для Z в виде $\partial Z/\partial \xi = \alpha Z$, что дает $Z(\xi) = \xi^\alpha$. Таким образом, более аккуратное рассмотрение приводит к той же самой степенной зависимости (4.33). При этом выясняется, что ослабление взаимодействия вследствие перенормировок тоже описывается степенной зависимостью: $\Gamma(\varepsilon) = \lambda(\varepsilon/\omega_0)^\alpha$.

Глава 5.

Идеальный ферми-газ

5.1. Электроны на ферми-поверхности

В этой главе собраны некоторые задачи, касающиеся свойств идеального ферми-газа. Строго говоря, все они могли бы быть решены без применения диаграмм. (Идеальный газ — вещь простая!) Однако, поскольку ферми-газ нас интересует, в основном, как возможность опробовать диаграммную технику, мы не будем использовать другие методы расчета.

Помимо этого, следует сказать, что в задачах с взаимодействием, которые будут рассмотрены в следующих главах, вычисления во многом опираются на более простые вычисления для идеального газа. Оказывается, что в диаграммах с взаимодействием можно выделить так называемые элементарные блоки. Выражения, соответствующие этим блокам, по своему виду такие же, как для идеального газа. Например, поляризационный оператор, возникающий в теории электрон-фононного взаимодействия и в теории ферми-жидкости, по своим свойствам оказывается близок к восприимчивости идеального газа (см. задачи 24, 31, 44 – 46).

Остановимся на важном свойстве симметрии ферми-газа. Речь идет о так называемой *электрон-дырочной симметрии на ферми-поверхности*, имеющей место при энергии электрон–дырочных возбуждений малой по сравнению с энергией Ферми. Как правило, интересные длинноволновые и низкочастотные эффекты в ферми-газе и ферми-жидкости связаны с возбуждениями вблизи уровня Ферми. Поэтому логично при вычислении таких величин выделять этот вклад заранее. Для этого пользуются следующим техническим приемом. Во всех диаграммах пренебрегают зависимостью плотности состояний $\nu(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми от энергии $\varepsilon = \xi(p)$, и полагают $\nu(\varepsilon) = \nu_0 = p_0 m/(2\pi^2\hbar^3)$. При этом интегралы по импульсам преобразуются следующим образом:

$$\int \ldots \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \quad \to \quad \frac{\nu_0}{4\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{|\mathbf{n}|=1} \ldots d\mathbf{n}\, d\xi\,, \tag{5.1}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ — единичный вектор. На жаргоне это называется «переход от интегрирования по p к интегрированию по ξ». Метод интегрирования по ξ обязан своей популярностью обеспечиваемой им точной симметрии между частицами и дырками с произвольной энергией, а не при $\varepsilon = \varepsilon_F$ (см. задачу 25), и помимо этого тому обстоятельству, что интегрировать по ξ обычно легче (см. задачи 23, 24).

Следует отметить, что электрон–дырочная симметрия является приближенной. Однако, поправки, нарушающие эту симметрию, оказываются важны только если в задаче существенны состояния, далекие от уровня Ферми. Возможность перейти при рассмотрении какого-либо графика к интегрированию по ξ означает, что изучаемый эффект «сидит на ферми-поверхности». В задачах этого и следующих разделов интегрирование по ξ окажется весьма полезным.

5.1.1. Формула Кубо.

В этом пункте мы рассмотрим задачу о нахождении динамической восприимчивости, описывающей какой–либо линейный отклик системы на переменное внешнее поле. С практической точки зрения, вопрос о восприимчивости представляет существенный интерес, поскольку большинство величин, измеряемых экспериментально, имеют характер линейных откликов (см. гл. 11). Стандартный метод работы с восприимчивостью использует запаздывающие и опережающие гриновские функции (см. формулу (5.10)), а также, в более сложных случаях, — мацубаровскую температурную технику и аналитическое продолжение с мнимых дискретных частот на действительные вещественные (см. формулу (7.28)). Но если система невзаимодействующая, можно поступить проще.

Восприимчивость величины A по отношению к величине B, дается так называемой формулой Кубо

$$\chi(\omega) = \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^\infty \langle\, [\widehat{A}(t), \widehat{B}(0)]\,\rangle\, e^{i\omega t}\, dt\,, \tag{5.2}$$

вывод которой приведен, например, в [5], § 126. Чтобы найти среднее коммутатора в (5.2) по основному состоянию системы невзаимодействующих частиц, запишем операторы $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ в представлении вторичного квантования:

$$\widehat{A}(t) = \sum_{m\,k} A_{mk}\psi_m^+\psi_k e^{-i(E_k-E_m)t},\ \ \widehat{B}(t) = \sum_{m\,k} B_{mk}\psi_m^+\psi_k e^{-i(E_k-E_m)t}\,. \tag{5.3}$$

Теперь подставим эти выражения в коммутатор $\langle\, [\widehat{A}(t), \widehat{B}(0)]\,\rangle$, и раскроем среднее по теореме Вика. Результат выглядит так [1]:

$$\chi(\omega) \;=\; \sum_{m\,k} A_{mk}B_{km}\,\frac{n(E_m)-n(E_k)}{E_k - E_m - \omega - i\delta}\,. \tag{5.4}$$

[1]Здесь мы будем считать температуру равной нулю. Отметим, однако, что вычисление по формуле Кубо всегда легко распространить на конечные температуры. При $T > 0$ усреднение в (5.2) берется по равновесному термодинамическому состоянию, и при взятии среднего по теореме Вика возникают зависящие от температуры числа заполнения состояний частиц. Например, для фермионов в (5.4) следует положить $n(E) = 1/(e^{E/T}+1)$.

Это выражение справедливо как для ферми-, так и для бозе-статистики. Если собственные функции и матричные элементы A_{mk}, B_{mk} известны, выражение (5.4) позволяет найти восприимчивость [2]. В случаях же, когда собственные функции неизвестны, формула (5.4) не особенно полезна.

Для таких более сложных случаев полезно иметь выражение восприимчивости непосредственно через функции Грина. Как известно, причинные функции Грина

$$G^c(x, x') = -i\langle \mathrm{T}\, \psi_\alpha(x)\psi^+_\beta(x')\rangle\,, \tag{5.5}$$

введенные в (2.8), полностью описывают основное состояние системы и дают все *статические* свойства [3]. Однако, оказывается, что изучать динамику с помощью этих функций нельзя (см. решение задачи 24 б). Чтобы преобразовать выражение (5.4) к форме, содержащей гриновские функции, нужно использовать *запаздывающие и опережающие* функции Грина.

Напомним определение запаздывающей и опережающей функций $G^R(t, t')$ и $G^A(t, t')$. Эти функции связаны с причинной функцией Грина так:

$$G^c(t, t') = \begin{cases} G^R(t, t'), & t > t'\,, \\ G^A(t, t'), & t < t'\,. \end{cases} \tag{5.6}$$

В частотном представлении $G^R(\varepsilon)$ и $G^A(\varepsilon)$ имеют простой смысл: они дают разложение G^c на функции частоты, регулярные, соответственно, в верхней или в нижней полуплоскости. Например, в случае фермионов

$$G^{R(A)}(\varepsilon, \mathbf{p}) = 1/(\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) \pm i\delta) \tag{5.7}$$

соответствуют вкладам частиц и дырок в причинную функцию Грина:

$$\begin{aligned} G^c(\varepsilon, \mathbf{p}) &= (1 - n(\mathbf{p}))G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) + n(\mathbf{p})G^A(\varepsilon, \mathbf{p}) = \\ &= \frac{1 - n(\mathbf{p})}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) + i\delta} + \frac{n(\mathbf{p})}{\varepsilon - \xi(\mathbf{p}) - i\delta}\,, \end{aligned} \tag{5.8}$$

где $n(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1, & |\mathbf{p}| < p_0 \\ 0, & |\mathbf{p}| > p_0 \end{cases}$ — фермиевская функция распределения.

Чтобы выразить восприимчивость через $G^R(\varepsilon)$ и $G^A(\varepsilon)$, представим энергетический знаменатель в (5.4) в виде интеграла по вспомогательной переменной:

$$\begin{aligned} \frac{1}{E_k - E_m - \omega - i\delta} &= \frac{1}{2\pi i}\int \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon + \omega - E_k - i\delta)(\varepsilon - E_m + i\delta)} = \\ &= \frac{1}{2\pi i}\int G^A_k(\varepsilon + \omega)G^R_m(\varepsilon)\, d\varepsilon\,, \end{aligned} \tag{5.9}$$

[2]Например, для идеального ферми-газа собственные функции — плоские волны, а матричные элементы операторов — просто их фурье-компоненты, так что нахождение любого линейного отклика с помощью (5.4) — по существу, тривиально (см. задачи 24, 25).

[3]Например, распределение плотности, спина, статическую поляризуемость (задачи 7, 8, 14, 23)

где $G_k^A(\varepsilon+\omega)$ и $G_m^R(\varepsilon)$ — запаздывающая и опережающая функции, взятые в диагональном представлении. Подставляя это выражение в (5.4), получаем выражение для восприимчивости:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2\pi i}\int \mathrm{Tr}\left(\left[\widehat{G}^A(\varepsilon+\omega)\widehat{B}\,,\,\widehat{G}^R(\varepsilon)\widehat{A}\right]\,\widehat{\rho}\right)\,d\varepsilon\,. \tag{5.10}$$

Здесь $\widehat{\rho}$ — матрица плотности системы (в диагональном представлении $\widehat{\rho}_{mk} = n(E_m)\delta_{mk}$); выражение в квадратных скобках представляет собой коммутатор операторов $\widehat{G}^A(\varepsilon+\omega)\widehat{B}$ и $\widehat{G}^R(\varepsilon)\widehat{A}$.

Основное преимущество выражения (5.10) по сравнению с (5.4) в том, что оно верно в произвольном базисе и, значит, может быть использовано даже если собственные функции неизвестны. Наиболее важный пример такой ситуации представляют задачи о проводимости и диффузии фермионов в случайном потенциале, которые мы рассмотрим в гл. 9. В случайном потенциале собственные функции меняются от одной реализации потенциала к другой, в то время как интерес представляют величины, усредненные по случайному потенциалу. Мы увидим, что усреднять функции Грина и их произведения оказывается гораздо удобнее, чем действовать «в лоб», используя (5.4).

Литература: Основное состояние и корреляционная функция идеального ферми-газа рассмотрены в [3], § 9.1–9.3 без использования вторичного квантования. Интересно сравнить этот подход с более стандартным изложением — см. [5], § 53, 55 – 58, а также [6], § 1 и [1], § 2. Определение и свойства функции Грина идеального ферми–газа обсуждаются в [6], § 9, 10. Обобщенная восприимчивость и формула Кубо рассмотрены в [5], § 123, 126. С применениями идеального ферми-газа в теории многоэлектронного атома можно ознакомиться по [2], § 70, а с применениями в теории металлов — по [3], гл. IX и [6], § 61.

5.2. Задачи 22 – 27

Задача 22. (*Функция Грина в координатном представлении.*) Найдите функцию Грина $G(\varepsilon, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| p_0 \gg 1$ двумя способами: сначала интегрируя по ξ от $-\infty$ до $+\infty$, а затем точно, интегрируя по d^3p. Сравните результаты.

Задача 23. (*Эффект Рудермана-Киттеля.*) В ферми-газе находится локализованный спин $\mathbf{S}$, взаимодействующий с локальной спиновой плотностью электронов:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}} = JS^i\widehat{\sigma}^i(\mathbf{r}=0)\,, \tag{5.11}$$

где $\widehat{\sigma}^i(\mathbf{r}) = \psi_\alpha^+(\mathbf{r})\sigma_{\alpha\beta}^i\psi_\beta(\mathbf{r})$.

Найдите распределение поляризации спина электронов $\sigma^i(\mathbf{r}) = \langle\widehat{\sigma}^i(\mathbf{r})\rangle$ на больших расстояниях от спина $\mathbf{S}$: $|\mathbf{r}|p_0 \gg 1$. Покажите, что поляризация осциллирует, как функция координат, и определите период осцилляции [4]. Считайте взаимодействие J малым.

[4] Эту задачу удобно решать, используя координатное представление для гриновских функций (см. задачу 22).

Задача 24. а) Коррелятор плотность-плотность ферми-газа $\langle \mathrm{T}\widehat{n}(\mathbf{r},t)\widehat{n}(\mathbf{r}',t')\rangle$ дается диаграммой, изображенной на рис. 5.1. Найдите этот коррелятор в частотно-импульсном представлении при малых $\omega \ll E_F$, $|\mathbf{k}| \ll p_0$.

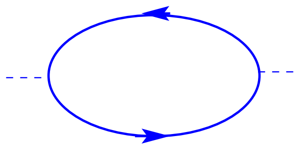


Рис. 5.1

б) (*Динамическая спиновая восприимчивость.*) Найдите парамагнитный вклад в магнитную восприимчивость $\chi(\omega,k)$ электронного газа при $T=0$, т. е. отклик спиновой поляризации в ответ на приложенное переменное магнитное поле. Считайте, что $|\omega| \ll E_F$, $|k| \ll p_0$. Проверьте, что в пределе $\omega/k \to 0$, $k \to 0$, получается восприимчивость Паули $\chi = 2\mu_B^2\nu_0$, где $\nu_0 = p_0 m/(2\pi^2\hbar^3)$ — плотность состояний на уровне Ферми.

Задача 25. (*Отклик плотность-плотность при D=1.*) Рассмотрим *одномерный* ферми-газ во внешнем переменном поле,

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t) = -\int \varphi(x,t)\,\widehat{n}(x,t)\,dx\,. \tag{5.12}$$

Рассмотрим линейный отклик плотности $\widehat{n}(x,t)$ на поле $\varphi(x,t)$. Его можно записать так:

$$\langle \widehat{n}(x,t)\rangle = \int\limits_{t'<t}\!\!\int Q(x-x',t-t')\,\varphi(x',t')\,dx'\,dt'\,, \tag{5.13}$$

или, в Фурье-представлении, $\langle \widehat{n}_{k,\omega}\rangle = Q(k,\omega)\ \varphi_{k,\omega}$. Функцию отклика $Q(k,\omega)$ можно определить, пользуясь формулой Кубо, как в задаче 24 б, с заменой операторов плотности спина на операторы плотности числа частиц.

Найдите $Q(k,\omega)$ при малых k и ω, $|k| \ll p_0$, $|\omega| \ll E_F$. Сравните с функцией Грина фононов (4.7).

Задача 26. (*Флуктуации числа фермионов на прямой.*) Для газа бесспиновых ферми-частиц на прямой запишите оператор $\widehat{N}_L$ числа частиц внутри интервала $0<x<L$ (см. [5], § 117). Для больших $L \gg p_0^{-1}$ получите формулу

$$\langle \delta N_L^2\rangle = \langle N_L^2\rangle - \langle N_L\rangle^2 = \frac{1}{\pi^2}\ln(p_0 L)\,.. \tag{5.14}$$

Любопытно, что флуктуации (5.14) неэкстенсивны (неаддитивны по длине интервала), в отличие от классических термодинамических флуктуаций. Неэкстенсивность есть проявление квантовых корреляций. При конечной температуре экстенсивность восстанавливается на масштабах, превосходящих тепловую длину: $L \gg L_T = \hbar v_F/T$.

Более трудным оказывается вопрос о нахождении полной статистики распределения числа частиц в конечном интервале. С помощью метода бозонизации, изложенного в гл. 12, можно показать, что это распределение нормальное:

$$P(n) \approx \exp\Big(-(n-a)^2/2b\Big)\,, \tag{5.15}$$

где $a = \langle N_L \rangle$, $b = \langle\langle N_L^2 \rangle\rangle$. Элементарное решение этой задачи авторам неизвестно.

Задача 27*. (*Катастрофа ортогональности.*) В идеальный ферми-газ вносят примесь, на потенциале $U(\mathbf{r})$ которой частицы могут упруго рассеиваться. Оказывается, основное состояние системы при этом полностью изменяется, даже если потенциал $U(\mathbf{r})$ произвольно мал. В случае, когда рассеяние происходит только в s–канале, можно получить следующую оценку для интеграла перекрытия состояний[5]:

$$\langle 0'|0\rangle \approx (p_0 L)^{-\alpha}\,, \quad \alpha = \delta_0^2/\pi^2\,, \tag{5.16}$$

где $|0\rangle$ и $|0'\rangle$ — основные состояния ферми-системы до и после внесения примеси, δ_0 — фаза рассеяния в s–канале при $\varepsilon = E_F$, а L — размер системы[6].

Этот удивительный и важный результат был вначале получен элементарными средствами, путем явного выписывания слэтеровского детерминанта и оценки интеграла перекрытия[7]. Попытаемся перевести задачу о перекрытии основных состояний на язык диаграммной техники. Будем включать потенциал примеси плавно от $t = -\infty$ до $t = 0$:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t) = e^{\gamma t}\int U(\mathbf{r})\,\psi^+(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,d^3r. \tag{5.17}$$

Рассмотрим среднее S-матрицы по основному состоянию ферми-газа при $U(\mathbf{r}) = 0$,

$$K_\gamma = \left\langle \mathrm{T}\ \exp\left(-i\int_{-\infty}^0 \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)\,dt\right)\right\rangle\,. \tag{5.18}$$

При $\gamma \to 0$ величина K_γ стремится к $\langle 0|0'\rangle$. (Почему?)

а) Покажите, что

$$\ln K_\gamma = \sum_{n=1}^{\infty} F_n/n\,, \tag{5.19}$$

где

$$F_n = (-i)^n \int \ldots \int \langle\langle \mathrm{T}\ \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t_1)\ldots\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t_n)\rangle\rangle\,dt_n\ldots dt_1\,, \tag{5.20}$$

причем $\langle\langle\ldots\rangle\rangle$ означает, что учитываются только связные графики (см. теорему о разложении по связным диаграммам в [1], § 15).

б) Изобразите графически F_1, F_2, F_3. Сколько графиков соответствует каждому F_n? Какие выражения сопоставляются графическим элементам? Катастрофе ортогональности отвечает $K_{\gamma\to 0} \to 0$, т. е.

$$\mathrm{Re}\ln K_\gamma \to -\infty \quad \text{при} \quad \gamma \to 0\,. \tag{5.21}$$

[5] Для бесспиновых фермионов показатель степени в (5.16) есть $\alpha = \delta_0^2/(2\pi^2)$.

[6] $L \approx 2\pi N^{1/3}/p_0$, где N — полное число частиц.

[7] P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.*, v. 18, p. 1049 (1967)

Покажите, что F_1 дает чисто мнимый вклад, имеющий смысл перенормировки энергии основного состояния. А вот уже $\mathrm{Re}\, F_2 \sim \ln\gamma$. Считая $U(\mathbf{r})$ слабым и используя приближение δ-функции $U(\mathbf{r}) = \alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, найдите $\mathrm{Re}\, F_2$ и оцените K_γ, отбросив вклады F_n более высокого порядка.

в) Каким образом, зная K_γ, можно оценить перекрытие основных состояний $\langle 0|0'\rangle$? Покажите, что для этого следует положить γ порядка обратного расстояния между уровнями в системе, соответствующими состояниям с угловым моментом $l = 0$.

В приложениях часто возникает вопрос о катастрофе ортогональности для произвольного потенциала, не обязательно слабого. Как будет показано в гл. 12 (задача 78), и в этом случае можно выразить перекрытие старого и нового основных состояний через фазы рассеяния. Причем если имеется только s-рассеяние, формула (5.16) остается справедливой.

5.3. Решения задач 22 – 27

22. Найдем функцию Грина, интегрируя по ξ. Начнем с интегрирования по углам:

$$G(\varepsilon, r) = \iint \frac{e^{ipr\cos\theta}}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta\ \mathrm{sign}\,\varepsilon}\, \frac{p^2 dp \sin\theta d\theta}{(2\pi)^2} = \frac{1}{2\pi^2 r}\int_0^\infty \frac{p\sin pr\ dp}{\varepsilon - \xi(p) + i\delta\ \mathrm{sign}\,\varepsilon}\,, \tag{5.22}$$

где $\xi(p) = p^2/2m - E_F$. Выражаем p через ξ и интегрируем по ξ вычетами, представив синус как разность экспонент:

$$G(\varepsilon, r) = \frac{1}{2\pi^2 r}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(p_0 + \xi/v_F)r}{\varepsilon - \xi + i\delta\ \mathrm{sign}\,\varepsilon}\, \frac{p_0 d\xi}{v_F} = -\frac{m}{2\pi r}\ e^{ir\left(\mathrm{sign}\,\varepsilon p_0 + |\varepsilon|/v_F\right)}\,. \tag{5.23}$$

Найденная функция Грина осциллирует с периодом, равным фермиевской длине волны $\lambda_0 = 2\pi\hbar/p_0$. Из–за эффектов ферми-статистики фаза осцилляций меняет знак на уровне Ферми (при $\varepsilon = 0$).

Теперь выполним точное интегрирование по p. Выражение (5.22) есть четная функция p, поэтому можно распространить интеграл по p на всю вещественную ось и разделить результат пополам:

$$\frac{1}{4\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p\sin pr\ dp}{\varepsilon - p^2/2m + E_F + i\delta\ \mathrm{sign}\,\varepsilon}\,. \tag{5.24}$$

Разлагаем это выражение на простейшие дроби и интегрируем:

$$\frac{m}{4\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\varkappa - p} - \frac{1}{\varkappa + p}\right)\sin pr\ dp \ = \ -\frac{m}{2\pi r}\ e^{i\,\mathrm{sign}\,\varepsilon\,\varkappa r}\,, \tag{5.25}$$

где $\varkappa = \sqrt{2m(E_F + \varepsilon + i\delta\,\mathrm{sign}\,\varepsilon)}$. Видим, что интегрирование по ξ дает хорошую точность при энергии ε много меньше фермиевской, $|\varepsilon| \ll E_F$.

23. Запишем спиновую поляризацию $\sigma^i(\mathbf{r}) = \langle \psi^+_\alpha(\mathbf{r})\sigma^i_{\alpha\beta}\psi_\beta(\mathbf{r})\rangle$ через точную функцию Грина:

$$\sigma^i(\mathbf{r}) = -i\,\mathrm{Tr}\,(\widehat{\sigma}^i\widehat{G}) = \lim_{\substack{t'\to t+0\\ \mathbf{r}=\mathbf{r}'}} \left(-i\sigma^i_{\alpha\beta}G_{\beta\alpha}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')\right)\,, \tag{5.26}$$

где подразумевается суммирование по спиновым индексам α, β.

Функция Грина G выражается через функцию G_0 ферми-газа в виде ряда, аналогичного ряду (3.11) для амплитуды рассеяния, рассмотренному в гл. 3. При этом оператор

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}} = J\int S^i\delta^{(3)}(\mathbf{r})\,\psi^+_\alpha(\mathbf{r})\sigma^i_{\alpha\beta}\psi_\beta(\mathbf{r})\;d^3r \tag{5.27}$$

играет роль потенциала возмущения.

Интересующий нас эффект возникает в первом порядке по J:

$$G^{(1)}_{\alpha\beta}(\varepsilon,\mathbf{r},\mathbf{r}') = JS^i\sigma^i_{\alpha\beta}G_0(\varepsilon,\mathbf{r})G_0(\varepsilon,-\mathbf{r}')\,. \tag{5.28}$$

Подставляем $G^{(1)}_{\alpha\beta}$ в (5.26):

$$\sigma^i(\mathbf{r}) = -2iJS^i\int G_0^2(\varepsilon,\mathbf{r})\,\frac{d\varepsilon}{2\pi}\,. \tag{5.29}$$

Воспользуемся результатом (5.23) задачи 22 для $G_0(\varepsilon,r)$ при $p_0r \gg 1$:

$$\int\frac{d\varepsilon}{2\pi}{G_0}^2(\varepsilon,r) = \left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2\int\limits_0^\infty\Big(e^{2ir(p_0+\varepsilon/v_F)}+ \\ +e^{-2ir(p_0r-\varepsilon/v_F)}\Big)\,\frac{d\varepsilon}{2\pi} = i\frac{mp_0}{(2\pi)^3}\,\frac{\cos 2p_0r}{r^3}\,. \tag{5.30}$$

Получаем затухающие осцилляции с периодом π/p_0:

$$\sigma^i(r) = \;J\,S^i\;\frac{mp_0}{4\pi^3}\;\frac{\cos 2p_0r}{r^3}\,. \tag{5.31}$$

Точное выражение для плотности спина можно получить, взяв точную функцию Грина (5.25) и проинтегрировав ее квадрат в (5.29) по ε:

$$\sigma^i(r) = \;J\,S^i\;\frac{2mp_0^4}{\pi^3}\left(\frac{\cos x}{x^3} - \frac{\sin x}{x^4}\right)\,, \tag{5.32}$$

где $x = 2p_0r$. Видим, что в асимптотике, т. е. на больших расстояниях, результат все более приближается к (5.31), что согласуется с «идеологией» интегрирования по ξ. Кроме того, отметим, что сингулярность точного выражения (5.32) при малых r имеет характер r^{-1}. Таким образом, при взятии интеграла по d^3r расходимости для полной поляризации не возникает. Выражение (5.31) более сингулярно, но при малых

r по самому своему происхождению оно неприменимо, поскольку интегрирование по ξ гарантирует правильность ответа только на больших расстояниях.

24 а. Запишем выражение, соответствующее диаграмме на рис. 5.1:

$$\Pi(\omega, k) = -2i \iint G_0(\varepsilon_+, \mathbf{q}_+) G_0(\varepsilon_-, \mathbf{q}_-) \, \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \,, \tag{5.33}$$

где $\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \omega/2$, $\mathbf{q}_\pm = \mathbf{q} \pm \mathbf{k}/2$, а множитель 2 возникает при суммировании по спинам. В интеграле (5.33) существенными оказываются $\mathbf{q}_\pm$ вблизи ферми-поверхности, поэтому при $|\mathbf{k}| \ll p_0$ удобно разложить $|\mathbf{q}_\pm|$ так: $|\mathbf{q}_\pm| = q \pm (k/2)\cos\theta$, где θ — угол между векторами $\mathbf{q}$ и $\mathbf{k}$. Тогда функция

$$G_0(\varepsilon_\pm, \, q_\pm) = \frac{1}{\varepsilon_\pm - \xi_\pm + i\delta \, \mathrm{sign}\, \xi_\pm} \,, \tag{5.34}$$

где $\xi_\pm(q) = \xi(q_\pm) = \xi(q) \pm (v_F k/2)\cos\theta$. Интегрируем (5.33) по ε, замыкая контур в верхней полуплоскости ω и раскладывая произведение G_0 на простейшие дроби. Интеграл отличен от нуля, если полюсы функций G_0 лежат в разных полуплоскостях:

$$\begin{aligned} &\int \frac{d\varepsilon}{(\varepsilon + \omega/2 - \xi_+ + i\delta \, \mathrm{sign}\, \xi_+)\,(\varepsilon + \omega/2 - \xi_- + i\delta \, \mathrm{sign}\, \xi_-)} = \\ &\qquad = \frac{2\pi i \, [n(\xi_-) - n(\xi_+)]}{\omega - v_F k \cos\theta + i\delta \, (\mathrm{sign}\, \xi_+ - \mathrm{sign}\, \xi_-)} \,, \end{aligned} \tag{5.35}$$

где $n(\xi)$ — фермиевская функция заполнения. Поскольку k мало, разность $n(\xi_-) - n(\xi_+)$ отлична от нуля в тонком слое вблизи поверхности Ферми. Следовательно, можно проинтегрировать по ξ. В зависимости от знака $\cos\theta$ возможны два случая:

(1) $\cos\theta > 0$. Выражение (5.35) отлично от нуля при $|\xi| < (v_F k/2)\cos\theta$, причем $n(\xi_-) - n(\xi_+) = -1$;

(2) $\cos\theta < 0$. Выражение (5.35) отлично от нуля при $|\xi| < -(v_F k/2)\cos\theta$, причем $n(\xi_-) - n(\xi_+) = 1$.

Итак, остается интеграл по углам:

$$\Pi(\omega, k) = \nu_0 \int_0^\pi \frac{v_F k \, \cos\theta}{\omega - v_F k \cos\theta + i\delta \, \mathrm{sign}\, \omega} \sin\theta \, d\theta \,, \tag{5.36}$$

где $\nu_0 = m p_0/(2\pi^2\hbar^3)$ — плотность состояний. Обозначим $x = \cos\theta$ и вычислим

$$\int_{-1}^{1} \frac{x\, dx}{x_0 - x + i\delta \, \mathrm{sign}\, x_0} = A + iB \,, \quad \text{где} \tag{5.37}$$

$$A = -2 + x_0 \ln\left|\frac{x_0 + 1}{x_0 - 1}\right| , \quad B = \begin{cases} 0 & \text{при } |x_0| > 1 \,, \\ -\pi x_0 & \text{при } 0 < x_0 < 1 \,, \\ \pi x_0 & \text{при } -1 < x_0 < 0 \;. \end{cases} \tag{5.38}$$

Получаем

$$\Pi(\omega,\,k) = -2\nu_0\left[1 - \frac{\omega}{2kv_F}\ln\left|\frac{kv_F+\omega}{kv_F-\omega}\right| + \frac{\pi i}{2}\frac{|\omega|}{kv_F}\theta\left(1-\frac{|\omega|}{kv_F}\right)\right]. \qquad (5.39)$$

24 б. *(Первое решение.)* Диаграмма для спинового коррелятора отличается от диаграммы на рис. 5.1 лишь незначительно — наличием спиновых операторов в вершинах. Соответствующее аналитическое выражение отличается от (5.33) спиновым множителем $\mathrm{Tr}\,\sigma^i\sigma^j = 2\delta_{ij}$. Поэтому, на первый взгляд, для отыскания спиновой восприимчивости можно просто воспользоваться результатом решения задачи 24 а.

В том, что это неверно, легче всего убедиться, заметив, что выражение (5.39) для $\Pi(\omega,k)$ как функции частоты ω не обладает аналитическими свойствами восприимчивости, поскольку имеет особенности в полуплоскости $\mathrm{Im}\,\omega > 0$. Последнее видно уже из выражения (5.35), устроенного так, что в зависимости от знаков ξ_+ и ξ_- полюс по ω может оказаться в верхней полуплоскости, в нижней, или на веществеой оси. Это автоматически приводит к нарушению причинности и в окончательном ответе (5.39).

С формальной точки зрения проблема состоит в том, что в петле на рис. 5.1 были взяты причинные функции Грина. Поэтому по своим аналитическим свойствам петля из причинных гриновских функций соответствует поляризационному оператору, а не восприимчивости, и аналитические свойства оказываются следующими: $\Pi(-\omega) = \Pi(\omega)$, а не $\chi(-\omega^*) = \chi^*(\omega)$. В результате особенности на плоскости комплексного ω оказываются расположенными симметрично относительно $\omega = 0$.

Отметим, что на самом деле восприимчивость и поляризационный оператор можно связать друг с другом с помощью мацубаровской техники, используя мнимые частоты и метод аналитического продолжения (см. задачу 37, гл. 7). При этом выясняется, что надо взять выражение (5.39) для петли на рис. 5.1 при $\omega > 0$ и продолжить в верхнюю полуплоскость комплексного ω, а с нее — на $\omega < 0$. (Так что приведенное выше соображение не совсем уж и неправильное!).

Однако пока мы не будем использовать эту связь, а проделаем прямое вычисление по формуле Кубо. Возьмем в качестве $\widehat{A}(t)$ и $\widehat{B}(t)$ в (5.2) оператор плотности намагниченности:

$$\widehat{s}_z(\mathbf{r},t) = \mu_B\left[\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t) - \widehat{\psi}^+_\downarrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r},t)\right]. \qquad (5.40)$$

Раскроем среднее коммутатора в (5.2) по теореме Вика как сумму всевозможных парных средних операторов ψ и ψ^+, и оставим только связные графики:

$$\chi_{\omega,\mathbf{k}} = 2i\,\mu_B^2\iint e^{i\omega t+i\mathbf{kr}}\,\left[\langle\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\uparrow(0,0)\rangle\langle\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}^+_\uparrow(0,0)\rangle\ - \right.$$
$$\left. -\ \langle\widehat{\psi}^+_\uparrow(0,0)\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t)\rangle\langle\widehat{\psi}_\uparrow(0,0)\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\rangle\right]\,dt\,d^3r \qquad (5.41)$$

(двойка учитывает спин). Средние вычисляем непосредственно по определению операторов вторичного квантования [8]:

$$\langle \widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}',t')\rangle = \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\xi(\mathbf{p})(t'-t)+i\mathbf{p}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\, n(\xi(\mathbf{p}))\,, \tag{5.42}$$

$$\langle \widehat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r},t)\widehat{\psi}^+_\uparrow(\mathbf{r}',t')\rangle = \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\xi(\mathbf{p})(t'-t)+i\mathbf{p}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}\, [1-n(\xi(\mathbf{p}))]\,, \tag{5.43}$$

где $n(\xi)$ — фермиевская функция распределения. Делая преобразование Фурье, получаем для $\chi_{\omega,\mathbf{k}}$ такое выражение:

$$2i\mu_B^2 \iint\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\ |\mathbf{q}_-|<p_0}} \left[G^R(\varepsilon_+,\mathbf{q}_+)\,G^A(\varepsilon_-,\mathbf{q}_-) - G^A(\varepsilon_-,\mathbf{q}_+)\,G^R(\varepsilon_+,\mathbf{q}_-)\right]\frac{d\varepsilon d^3q}{(2\pi)^4}\,, \tag{5.44}$$

где запаздывающая и опережающая гриновские функции есть

$$G^{R,A}(\varepsilon,\,\mathbf{q}) = \frac{1}{\varepsilon-\xi(\mathbf{q})\pm i\delta}\,. \tag{5.45}$$

Интегрирование по ε дает

$$\int G^R(\varepsilon_+,\mathbf{q}_+)\,G^A(\varepsilon_-,\mathbf{q}_-)\,d\varepsilon\; = \;\frac{2\pi i}{\omega - v_F k\cos\theta + i\delta}\,, \tag{5.46}$$

где θ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{q}$. Вместо (5.35) получаем

$$\chi_{\omega,k} = -\frac{\mu_B^2}{4\pi^3}\int\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\ |\mathbf{q}_-|<p_0}}\left[\frac{1}{\omega - v_F k\cos\theta + i\delta} - \frac{1}{\omega + v_F k\cos\theta + i\delta}\right] d^3q\,. \tag{5.47}$$

Это выражение имеет ясный смысл: переменное внешнее поле возбуждает электрон-дырочную пару. Электрон имеет импульс $\mathbf{q}_+$, а дырка — $\mathbf{q}_-$. Принцип Паули накладывает ограничение на фазовый объем: $|\mathbf{q}_+| > p_0$, $|\mathbf{q}_-| < p_0$, откуда следует, что $\cos\theta > 0$. Энергия пары есть $\xi(\mathbf{q}_+) - \xi(\mathbf{q}_-) = v_F k\cos\theta$, и поскольку нас интересует предел малых k, энергии электрона и дырки малы. Из приведенного выражения для энергии пары следует, что и электронное, и дырочное состояние отстоят от уровня Ферми не более чем на kv_F. Нас интересуют малые k, поэтому в интеграле по q^2dq можно перейти к интегрированию по ξ:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} n(\xi_-)\,(1-n(\xi_+))\,d\xi \; = \;\begin{cases} v_F k\cos\theta & \text{при } \cos\theta > 0\,,\\ 0 & \text{при } \cos\theta < 0\,.\end{cases} \tag{5.48}$$

Остается интеграл по углам $0 < \theta < \pi/2$. Обратим внимание на то, что замена $\omega + i\delta \to -\omega - i\delta$ эквивалентна замене $\theta \to \pi/2 - \theta$. Поэтому:

$$\chi_{\omega,k} = \mu_B^2\nu_0 \int\limits_0^{\pi} \frac{v_F k\,\cos\theta}{\omega - v_F k\cos\theta + i\delta}\sin\theta\,d\theta\,. \tag{5.49}$$

[8]Применяя теорему Вика, следует иметь в виду, что среднее в формуле Кубо не T-упорядоченное.

Сделаем обычную подстановку $x = \cos\theta$ и вычислим

$$\int\limits_{-1}^{1} \frac{x\,dx}{x_0 - x + i\delta} = -2 + x_0 \ln\left(\frac{x_0 + i\delta + 1}{x_0 + i\delta - 1}\right). \tag{5.50}$$

Полагая $x_0 = \omega/kv_F$, находим [9]

$$\chi_{\omega,\,k} = 2\mu_B^2\nu_0\left(1 - \frac{\omega}{2kv_F}\ln\left|\frac{kv_F+\omega}{kv_F-\omega}\right| + \frac{\pi i}{2}\frac{\omega}{kv_F}\theta\Big(1 - \frac{|\omega|}{kv_F}\Big)\right). \tag{5.51}$$

Соответственно, в статическом пределе $\omega/kv_F \to 0$, $\;k \to 0$, получаем равновесную паулиевскую восприимчивость: $\chi_{\rm para} = 2\mu_B^2\nu_0$.

24 б. *(Второе решение.)* Можно действовать иначе: сначала найти мнимую часть $\chi_{\omega,k}$, а затем восстановить по ней вещественную, пользуясь аналитическими свойствами восприимчивости. Физически мнимая часть χ описывает диссипацию, т. е. возбуждение переменным полем электрон-дырочных пар. Поэтому, как и в задаче 17, в петле на рис. 5.1 виртуальные состояния электрона и дырки надо брать на массовой поверхности $\varepsilon = \xi(q)$. Формально это соответствует замене

$$G^{A,R}(\varepsilon, \mathbf{q}) \to \pm i\pi\delta\left(\varepsilon - \xi(\mathbf{q})\right) \tag{5.52}$$

в выражении (5.33):

$$\operatorname{Im}\chi_{\omega,k} = 2\,\mu_B^2\,\pi^2 \int\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\ |\mathbf{q}_-|<p_0}} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\int \delta\left(\varepsilon_+ - \xi(\mathbf{q}_+)\right)\,\delta\left(\varepsilon_- - \xi(\mathbf{q}_-)\right)\,\frac{d\varepsilon}{2\pi}. \tag{5.53}$$

Смысл данного выражения в том, что в результате поглощения кванта $\hbar\omega$ переменного внешнего поля электрон с энергией ξ_- под уровнем Ферми возбуждается в состояние с энергией ξ_+ над уровнем Ферми. Это выражение дает $\mathrm{Im}\chi$ только при $\omega > 0$, а при $\omega < 0$ оно равно 0, как и должно быть для вероятности распада. Получив $\operatorname{Im}\chi$ при положительных ω, мы распространим его на отрицательные ω по свойству восприимчивости $\chi(-\omega) = \chi^*(\omega)$.

Интеграл по ε в (5.53) устраняет одну δ-функцию:

$$\operatorname{Im}\chi_{\omega,k} = \mu_B^2 \int\limits_{\substack{|\mathbf{q}_+|>p_0\\ |\mathbf{q}_-|<p_0}} \delta(\omega - \xi(\mathbf{q}_+) + \xi(\mathbf{q}_-))\,\frac{d^3q}{(2\pi)^2}. \tag{5.54}$$

Как и в предыдущем решении, поскольку нас интересует длинноволновый предел $k \ll p_0^{-1}$, переходим от интеграла по q^2dq к интегралу по ξ, который дает $kv_F\cos\theta$ при $\cos\theta > 0$, и 0 в противном случае. Остается интеграл по углам:

$$\int\limits_0^{\pi/2} v_Fk\,\cos\theta\,\delta(\omega - v_Fk\cos\theta)\,\sin\theta\,d\theta \;=\; \begin{cases}\omega & \text{при } 0 < \omega < kv_F\,,\\ 0 & \text{при } \omega > kv_F\,.\end{cases} \tag{5.55}$$

---

[9] Отметим, что выражение (5.39) для причинного коррелятора при $\omega > 0$ совпадает с выражением (5.51) для запаздывающего коррелятора, а при $\omega < 0$ отличается комплексным сопряжением.

Теперь, поскольку $\chi(-\omega) = \chi^*(\omega)$, берем нечетную функцию

$$\operatorname{Im}\chi_{\omega,k} = \mu_B^2\,\nu_0 \begin{cases} \omega & \text{при } |\omega| < kv_F\,, \\ 0 & \text{при } |\omega| > kv_F\,. \end{cases} \tag{5.56}$$

и восстанавливаем $\chi(\omega)$ по аналитичности:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{\pi}\int \frac{\operatorname{Im}\chi(\omega')d\omega'}{\omega' - \omega - i0}\,. \tag{5.57}$$

Это приводит к точно такому же интегралу, что и в предыдущем решении.

Заметим, что в более сложных ситуациях нахождение восприимчивости в два этапа (сначала мнимая часть, а затем вещественная) может оказаться удобнее прямого вычисления. Мнимая часть всегда связана с определенными процессами распада, поэтому она обычно имеет более прозрачную структуру, чем вещественная часть.

25. Нас интересует динамический отклик плотность–плотность. Вычислим его по формуле Кубо (5.2). Для бесспиновых электронов оператор плотности числа частиц есть

$$\widehat{n}(x,t) = \widehat{\psi}^+(x,t)\widehat{\psi}(x,t)\,, \tag{5.58}$$

поэтому

$$Q(\omega,k) = \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty \langle\, [\widehat{n}_k(t), \widehat{n}_k(0)]\,\rangle\; e^{i\omega t}\; dt\,. \tag{5.59}$$

Раскрываем среднее коммутатора по теореме Вика, как и в предыдущей задаче, и после интегрирования по ε, получаем выражение, аналогичное (5.47):

$$Q(\omega,k) = \int\limits_{\substack{|q_+|>p_0\\ |q_-|<p_0}} \left(\frac{1}{\omega - qk/m + i\delta} + \frac{1}{-\omega - qk/m - i\delta}\right)\frac{dq}{2\pi}\,. \tag{5.60}$$

Ограничения, накладываемые принципом Паули, означают, что q меняется в пределах

$$\begin{aligned} p_0 - k/2 < q < p_0 + k/2 \qquad & \text{при } k > 0\,, \\ -p_0 - |k|/2 < q < -p_0 + |k|/2 \qquad & \text{при } k < 0\,. \end{aligned} \tag{5.61}$$

Следовательно, при малых $k \ll p_0^{-1}$ в подинтегральном выражении (5.60) можно просто положить $q = p_0$ при $k > 0$, и $q = -p_0$ при $k < 0$. При этом мы пренебрегаем зависимостью скорости q/m от энергии в малой окрестности уровня Ферми. Иначе говоря, мы линеаризуем закон дисперсии:

$$\xi(p) = p^2/2m - E_F \;\to\; \xi(p) = v_F(|p| - p_0) \tag{5.62}$$

(что эквивалентно переходу к интегрированию по ξ). Получаем

$$Q(\omega,k) = \frac{k}{2\pi}\left(\frac{1}{\omega - v_F|k| + i\delta} - \frac{1}{\omega + v_F|k| + i\delta}\right)\,, \tag{5.63}$$

или

$$Q(\omega,k)=\frac{\nu_{1D}\,v_F^2k^2}{\omega^2-v_F^2k^2+i\delta\,\mathrm{sign}\,\omega}\,, \tag{5.64}$$

где $\nu_{1D}=1/\pi v_F$ — плотность состояний при $D=1$ без учета спинового вырождения. Учет спина увеличивает ν_{1D} вдвое.

26. Оператор числа частиц в интервале $0<x<L$ есть

$$\widehat{N}_L=\int\limits_0^L\widehat{n}(x)\,dx\,,\quad \widehat{n}(x)=\psi^+(x)\psi(x)\,, \tag{5.65}$$

а $\widehat{N}_L^2=\int\limits_0^L\int\limits_0^L\widehat{n}(x)\widehat{n}(x')\,dx\,dx'$. Плотность $\langle n\rangle=p_0/\pi$, следовательно,

$$\langle\widehat{N}_L\rangle=\int\limits_0^L\langle\widehat{n}(x)\rangle\,dx=\frac{p_0}{\pi}L\,. \tag{5.66}$$

Нас интересует

$$\langle\delta\widehat{N}_L^2\rangle=\int\limits_0^L\int\limits_0^L\langle\langle\widehat{n}(x)\widehat{n}(x')\rangle\rangle\,dx\,dx'\,, \tag{5.67}$$

где $\langle\langle...\rangle\rangle$ обозначает неприводимый коррелятор, получаемый «связным» усреднением.

Переходим к импульсному представлению: $\psi(x)=\sum\limits_p a_p\,e^{ipx}$. Тогда

$$\langle\widehat{N}_L^2\rangle=\sum_{p_1,p_2,p_3,p_4}\int\limits_0^L\int\limits_0^L\langle a_{p_1}^+a_{p_2}a_{p_3}^+a_{p_4}\rangle e^{ix(p_2-p_1)+ix'(p_4-p_3)}dx\,dx'\,. \tag{5.68}$$

Раскроем среднее по теореме Вика:

$$\langle a_{p_1}^+a_{p_2}a_{p_3}^+a_{p_4}\rangle=\langle a_{p_1}^+a_{p_2}\rangle\langle a_{p_3}^+a_{p_4}\rangle+\langle a_{p_1}^+a_{p_4}\rangle\langle a_{p_2}a_{p_3}^+\rangle\,. \tag{5.69}$$

Нас интересует только второе слагаемое, поскольку первое есть $\langle N_L\rangle^2$ и не дает вклада в неприводимый коррелятор. Получаем

$$\begin{aligned}\langle\langle n(x)n(x')\rangle\rangle&=\sum\langle a_{p_1}^+a_{p_2}\rangle\langle a_{p_3}^+a_{p_4}\rangle e^{ix(p_2-p_1)+ix'(p_4-p_3)}=\\&=\int\limits_{-p_0}^{p_0}e^{ip_1(x'-x)}\frac{dp_1}{2\pi}\times\Big(\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{ip_3(x-x')}\frac{dp_3}{2\pi}-\int\limits_{-p_0}^{p_0}e^{ip_3(x-x')}\frac{dp_3}{2\pi}\Big)=\\&=-\Big(\int\limits_{-p_0}^{p_0}e^{ip(x-x')}\frac{dp}{2\pi}\Big)^2+\int\limits_{-p_0}^{p_0}e^{ip(x-x')}\delta(x-x')\frac{dp}{2\pi}=\\&=-\frac{1}{\pi^2}\,\frac{\sin^2p_0(x-x')}{(x-x')^2}+\frac{p_0}{\pi}\delta(x-x')\,.\end{aligned} \tag{5.70}$$

Интегрируя это выражение, находим

$$\langle \delta N_L^2 \rangle = \frac{p_0}{\pi} L - \frac{1}{\pi^2} \int_0^L \int_0^L \frac{\sin^2 p_0(x-x')}{(x-x')^2}\, dx\, dx' \,. \tag{5.71}$$

Перейдем к новым координатам: $u = x - x'$, $v = x + x'$:

$$\int_0^L \int_0^L \frac{\sin^2 p_0(x-x')}{(x-x')^2}\, dx\, dx' = 2 \int_0^L du \frac{\sin^2 p_0 u}{u^2} \int_u^L dv =$$

$$= 2 \int_0^L (L-u) \frac{\sin^2 p_0 u}{u^2}\, du \approx 2\Big(\frac{\pi}{2} L p_0 - \frac{1}{2} \ln L p_0\Big) \,.$$

Итак, находим

$$\langle \delta N_L^2 \rangle = \frac{p_0}{\pi} L - \frac{p_0}{\pi} L + \frac{1}{\pi^2} \ln(L p_0) = \frac{1}{\pi^2} \ln(p_0 L) \,, \tag{5.72}$$

что и требовалось.

27. *(Первое решение.)* Будем считать электроны бесспиновыми и восстановим зависимость от спина в конце. Возьмем среднее S-матрицы по основному состоянию газа с $U(\mathbf{r}) = 0$,

$$K_\gamma = \Big\langle \mathrm{T}\, \exp(-i \int_{-\infty}^0 \widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t) dt) \Big\rangle \,, \tag{5.73}$$

и разложим экспоненту в ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{0} \int_{-\infty}^{t_1} \ldots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} (-i)^n \Big\langle \widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_1) \widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_2) \ldots \widehat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t_n) \Big\rangle\, dt_n \ldots dt_2 dt_1 \tag{5.74}$$

а) Выделим из суммы (5.74) часть с $n > 0$:

$$K_\gamma = 1 + \Lambda \,. \tag{5.75}$$

Можно обычным образом разложить $\ln K_\gamma$ в ряд по Λ:

$$\ln K_\gamma = \Lambda - \frac{1}{2} \Lambda^2 + \frac{1}{3} \Lambda^3 - \ldots \tag{5.76}$$

Подставим сюда выражение для Λ в виде суммы средних от членов разложения T-экспоненты в ряд и раскроем скобки. Изучив несколько низших порядков теории возмущений убедимся, что при раскрывании средних по теореме Вика сократятся все средние, за исключением связных графиков. Это наблюдение можно обобщить на графики произвольного порядка, и доказать так называемую *теорему о связных графиках.*

Теорема утверждает, что логарифм среднего S-матрицы можно представить в виде ряда:

$$\ln K_\gamma = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} F_n \,, \tag{5.77}$$

где каждое F_n дается *единственным* графиком (рис. 5.2). Доказательство теоремы о связных графиках нетрудно получить, заметив, что сокращение несвязных графиков есть факт чисто комбинаторного происхождения. Он опирается на свойства комбинаторных множителей, возникающих при раскрывании среднего (5.74) по теореме Вика, а также на свойства биномиальных коэффициентов, появляющихся из членов Λ^n в (5.76). Множители $1/n$ в (5.77) возникают потому, что способов «связного» усреднения $\langle\langle \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t_1) \ldots \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t_n)\rangle\rangle$ всего $(n-1)!$, а способов упорядочения времен в графике — $n!$.

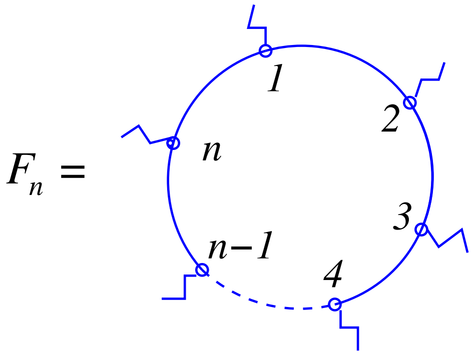


Рис. 5.2

Теорема (5.77) напоминает известную теорему о связных графиках для термодинамического потенциала Ω (см. [1], гл. III, § 15). Нетрудно заметить, что различие между усредняемыми величинами, $\ln\langle S\rangle$ в одном случае, и Ω — в другом, сводится просто к замене реального времени на мацубаровское. (Напомним, что $e^{\Omega/T}$ есть среднее от S-матрицы во мнимом времени — см. гл. 7.) Ход доказательства в обоих случаях один и тот же.

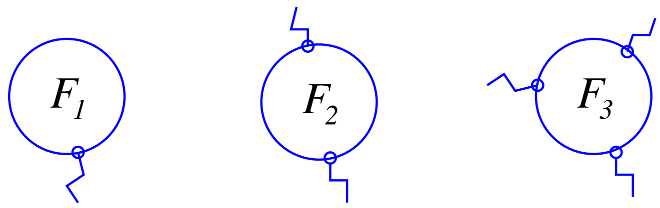


Рис. 5.3

б) Перейдем к рассмотрению членов ряда (5.77). Первые три графика ряда выглядят как показано на рис. 5.3. Вычисление удобно провести во временно́м представлении. Вклад F_1 имеет следующий вид:

$$F_1 = -i \int\limits_{-\infty}^{0} \langle \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)\rangle \, dt = -i \int\limits_{-\infty}^{0} \left(\int \langle \psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})U(\mathbf{r})\rangle \, d^3\mathbf{r} \right) e^{\gamma t} \, dt \; =$$

$$= -i\,\frac{n}{\gamma}\int U(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r}\,, \tag{5.78}$$

где n — плотность ферми-газа. Физически этот вклад связан со сдвигом энергии основного состояния, вычисленным в первом порядке теории возмущений. Поэтому он не имеет отношения к вопросу об ортогональности состояний. В самом деле, допустим, что в результате введения возмущения энергия основного состояния изменилась на $\delta\varepsilon$, а само состояние осталось в точности тем же. Тогда

$$\ln K_\gamma = -i\int\limits_{-\infty}^{0}\delta\varepsilon e^{\gamma t}dt = -i\,\delta\varepsilon/\gamma\,. \tag{5.79}$$

Вклад второго порядка F_2 есть

$$F_2 = \frac{(-i)^2}{2}\int\limits_{-\infty}^{0}\int\limits_{-\infty}^{0}\langle\!\langle \mathrm{T}\,\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t')\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)\rangle\!\rangle\,dt'\,dt = -\int\limits_{-\infty}^{0}\int\limits_{-\infty}^{t}\langle\!\langle \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t')\rangle\!\rangle\,dt'\,dt\,. \tag{5.80}$$

Выполняя усреднение в $\langle\!\langle \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t)\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(t')\rangle\!\rangle$ по теореме Вика, получаем

$$e^{\gamma t}e^{\gamma t'}\int\!\!\int U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}')\,\langle\psi^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r}',t')\rangle\,\langle\psi(\mathbf{r},t)\psi^+(\mathbf{r}',t')\rangle\,d^3\mathbf{r}\,d^3\mathbf{r}'\,. \tag{5.81}$$

Теперь заменим потенциал рассеяния на δ-функцию, $U(\mathbf{r}) = \alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, и вычислим парные средние в (5.81) следующим образом:

$$\langle\psi^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t')\rangle_{\mathbf{r}=0} = \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\xi(\mathbf{p})(t'-t)-\delta\xi(\mathbf{p})}n(\mathbf{p}) = \frac{\nu_0}{\delta+i(t-t')}\,, \tag{5.82}$$

$$\langle\psi(\mathbf{r},t)\psi^+(\mathbf{r},t')\rangle_{\mathbf{r}=0} = \sum_{\mathbf{p}} e^{i\xi(\mathbf{p})(t'-t)+\delta\xi(\mathbf{p})}(1-n(\mathbf{p})) = \frac{\nu_0}{\delta+i(t-t')} \tag{5.83}$$

Параметр $\delta \approx E_F^{-1}$ введен в (5.82), (5.83), чтобы регуляризовать интеграл по $\mathbf{p}$. Для вычисления этого интеграла мы воспользовались приближением постоянной плотности состояний в окрестности E_F и заменили интеграл по $\mathbf{p}$ интегралом по ξ. Такое приближение оправдано тем, что нас интересует инфракрасно расходящийся вклад в F_2, который определяется динамикой частиц с энергиями близкими к E_F.

Подставляя (5.82) и (5.83) в выражение (5.81), а последнее, в свою очередь, в (5.80), получаем

$$F_2 = -(\nu_0\alpha)^2\int\limits_{-\infty}^{0}\int\limits_{-\infty}^{t} e^{\gamma t}e^{\gamma t'}\frac{dt'\,dt}{(\delta+i(t-t'))^2}\,. \tag{5.84}$$

Этот интеграл нетрудно вычислить, если перейти к новым переменным $t_+ = -(t+t')$, $t_- = t-t'$, и учесть, что $dt\,dt' = (1/2)dt_+\,dt_-$. Интегрирование выполняется так:

$$F_2 = -\frac{1}{2}(\nu_0\alpha)^2\int\limits_{0}^{+\infty}dt_+ e^{-\gamma t_+}\int\limits_{t_+}^{\infty}\frac{dt_-}{(\delta+it_-)^2} = -\frac{1}{2}(\nu_0\alpha)^2\int\limits_{0}^{+\infty}\frac{e^{-\gamma t_+}}{t_+ + i\delta}dt_+\,. \tag{5.85}$$

В пределе $\gamma \to 0$, что соответствует медленному включению рассеивающего потенциала $U(\mathbf{r})$, интеграл по t_+ есть $-\ln(i\delta\gamma) \approx \ln(E_F/i\gamma)$. В результате получаем

$$\operatorname{Re} F_2 = -\frac{1}{2}(\nu_0\alpha)^2 \ln\left(E_F/\gamma\right) . \tag{5.86}$$

Мы отбросили мнимую часть F_2, поскольку она дает вклад только в неинтересующую нас фазу интеграла перекрытия K_γ.

Для слабого потенциала $U(\mathbf{r})$ величины F_n быстро убывают с ростом n, поскольку величина F_n пропорциональна n-й степени потенциала. Поэтому для оценки $|K_\gamma|$ достаточно учесть только $\operatorname{Re} F_2$, отбросив вклады с $n > 2$. Итак, мы получаем следующее выражение для интеграла перекрытия:

$$|K_\gamma| = (\gamma/E_F)^{\delta_0^2/2\pi^2} , \quad \delta_0 = \pi\alpha\nu_0 . \tag{5.87}$$

Нетрудно убедиться в том, что δ_0 есть в точности фаза рассеяния в s-канале на короткодействующем потенциале $U(\mathbf{r}) = \alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, взятая в первом борновском приближении.

Напомним, что при вычислении F_2 мы считали фермионы бесспиновыми. Учет двукратного спинового вырождения приводит к дополнительному множителю 2 в выражении (5.84) и далее. В результате множитель 1/2 в показателе степени в выражении (5.87) сокращается, и окончательный ответ выглядит так:

$$|K_\gamma| = (\gamma/E_F)^{\alpha} , \quad \alpha = \delta_0^2/\pi^2 . \tag{5.88}$$

в) Теперь, зная K_γ, оценим перекрытие основных состояний $\langle 0|0'\rangle$. Для этого полезно подумать о пределах применимости нашего вычисления. Со стороны малых γ имеется ограничение, связанное с конечностью размера системы. Мы считали плотность состояний непрерывной, как и полагается в теории ферми-газа. Однако в конечной системе уровни дискретны.

Оценим расстояние Δ между уровнями в сферическом объеме радиуса L. Если говорить о всех уровнях вместе, то, разумеется, $\Delta = (\frac{4\pi}{3}L^3\nu_0)^{-1}$. В нашей задаче, однако, важны только состояния с угловым моментом, равным нулю, которых гораздо меньше. Действительно, допустим, что потенциал расположен точно в центре сферы. Тогда угловой момент будет хорошим квантовым числом и, поскольку наш δ-потенциал рассеивает только s-волны, состояния с $l > 0$ «выходят из игры». Уровни же с $l = 0$, принимающие участие в рассеянии, расположены на расстоянии порядкау $\Delta_0 = \hbar v_F/L$ друг от друга. (Данная оценка справедлива в окрестности E_F.)

Теперь заметим, что при достаточно малом $\gamma \ll \Delta_0$ мы имеем дело со случаем адиабатически медленного включения возмущения. При этом как во время, так и после действия возмущения состояние системы остается экспоненциально близким к основному, и, следовательно,

$$|K|_{\gamma\ll\Delta_0} \;=\; |\langle 0|0'\rangle| + \mathrm{O}(e^{-\Delta_0/\gamma}) . \tag{5.89}$$

В принципе, пользоваться обычной теорией возмущений для вычисления K_γ можно только для $\gamma \gg \Delta_0$. Однако по порядку величины правильный результат получится, если приравнять $K_{\gamma=\Delta_0}$ и $\langle 0|0'\rangle$. Поэтому полагаем

$$\gamma \approx \Delta_0 = \hbar v_F/L\,, \tag{5.90}$$

что дает требуемую оценку перекрытия основных состояний:

$$\langle 0|0'\rangle \;\approx\; (p_0 L)^{-\alpha}\,, \quad \alpha = \delta_0^2/\pi^2\,, \tag{5.91}$$

где $\delta_0 = \pi\alpha\nu_0$.

Выражение (5.91) получено для слабого потенциала возмущения. Более точная оценка интеграла перекрытия $\langle 0|0'\rangle$, не использующая предположение о слабом возмущении, потребовала бы суммирования всего ряда (5.19), поскольку в каждом порядке имеется логарифмическая расходимость, подобная найденной выше для F_2. Эта более сложная задача может быть решена при помощи метода бозонизации (см. задачу 78, гл. 12).

27 б. *(Второе решение.)* Вычислим F_2, используя технику причинных функций Грина. Для этого рассмотрим первое из выражений (5.80) и раскроем среднее $\langle\!\langle \mathrm{T}...\rangle\!\rangle$ обычным образом как произведение причинных гриновских функций. Как и выше, заменяем потенциал $U(\mathbf{r})$ на δ-функцию $\alpha\delta^{(3)}(\mathbf{r})$. В частотном представлении гамильтониан возмущения $\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int} = \alpha e^{\gamma t}\psi^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)|_{\mathbf{r}=0}$ принимает следующий вид:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\omega) \;=\; \frac{\alpha}{\gamma - i\omega}\sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} a^+_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}'}\,. \tag{5.92}$$

Подставляя это выражение в (5.80) и переходя к интегралам по $\xi(\mathbf{p})$ и $\xi(\mathbf{p}')$, получаем

$$\begin{aligned} F_2 = -\frac{1}{2}\nu_0^2 \int \frac{G(\omega_1,\xi_1)\,\alpha}{\gamma - i(\omega_2-\omega_1)}\frac{G(\omega_2,\xi_2)\,\alpha}{\gamma - i(\omega_1-\omega_2)}\frac{d\omega_1\,d\omega_2\,d\xi_1\,d\xi_2}{(2\pi)^2} = \\ = -\frac{1}{2}\alpha^2\nu_0^2 \int\!\!\int I(\xi_1,\xi_2)\,d\xi_1\,d\xi_2\,. \end{aligned} \tag{5.93}$$

Мы ввели обозначение

$$I(\xi_1,\xi_2) = \int\!\!\int \frac{G(\omega_1,\xi_1)\,G(\omega_2,\xi_2)}{(\omega_1-\omega_2)^2+\gamma^2}\frac{d\omega_1\,d\omega_2}{(2\pi)^2}\,, \tag{5.94}$$

где $G(\omega,\xi) = 1/(\omega - \xi + i\delta\,\mathrm{sign}\,\xi)$. Как и выше, нам будет удобно считать фермионы бесспиновыми и восстановить зависимость от спина в конце.

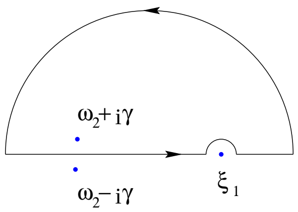


Рис. 5.4

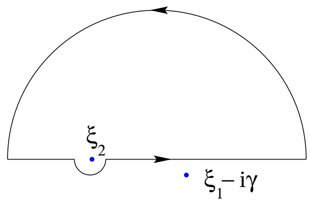


Рис. 5.5

Вычислим интеграл (5.94) по $\omega_{1,2}$, используя теорему Коши и теорию вычетов. Рассмотрим сначала случай $\xi_1 > 0$ (рис. 5.4). Проинтегрировав по ω_1, находим

$$I = \frac{1}{2\gamma}\int \frac{d\omega_2/2\pi}{(\omega_2 - \xi_1 + i\gamma)(\omega_2 - \xi_2 + i\delta\xi_2)}\,. \tag{5.95}$$

Интеграл отличен от 0 только при $\xi_2 < 0$ (рис. 5.5). В этом случае получаем

$$I = \frac{i}{2\gamma}\,\frac{\theta(\xi_1)\theta(-\xi_2)}{\xi_2 - \xi_1 + i\gamma} \tag{5.96}$$

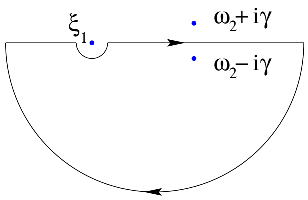


Рис. 5.6

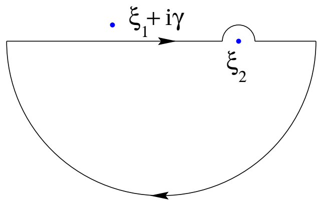


Рис. 5.7

Рассмотрим теперь случай $\xi_1 < 0$ (рис. 5.6). Проинтегрировав по ω_1, находим

$$I = \frac{1}{2\gamma}\int \frac{d\omega_2/2\pi}{(\omega_2 - \xi_1 - i\gamma)(\omega_2 - \xi_2 + i\delta\xi_2)}\,. \tag{5.97}$$

Данный интеграл отличен от 0 только при $\xi_2 > 0$ (рис. 5.7) и равен

$$I = \frac{i}{2\gamma}\frac{\theta(-\xi_1)\,\theta(\xi_2)}{\xi_1 - \xi_2 + i\gamma} \tag{5.98}$$

Собирая эти результаты в одно выражение, получаем

$$F_2 = i\frac{\alpha^2\nu_0^2}{4\gamma}\int\limits_{\xi_1\xi_2<0}\frac{d\xi_1\,d\xi_2}{|\xi_1 - \xi_2| - i\gamma}\,. \tag{5.99}$$

Как уже отмечалось, мнимая часть $\ln K_\gamma$ не имеет отношения к вопросу об ортогональности. Поэтому оставляем только вещественную часть:

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} F_2 &= -\frac{\alpha^2\nu_0^2}{4}\int\limits_{\xi_1\xi_2<0}\frac{d\xi_1\,d\xi_2}{(\xi_1-\xi_2)^2+\gamma^2} = \\ &= -\frac{1}{4}(\alpha\nu_0)^2\int\limits_0^{\xi_{\max}}\frac{2\xi\,d\xi}{\xi^2+\gamma^2} = -\frac{1}{4}(\alpha\nu_0)^2\ln\frac{\xi_{\max}^2+\gamma^2}{\gamma^2}\,.\end{aligned}$$

Интеграл обрезается сверху при $\xi_{\max} \approx E_F = p_0^2/2m \gg \gamma$, поэтому окончательно имеем

$$\operatorname{Re} F_2 \;=\; -(\delta_0^2/2\pi^2)\,\ln(E_F/\gamma)\,, \quad \delta_0 = \pi\alpha\nu_0\,. \tag{5.100}$$

Учет двукратного спинового вырождения дает дополнительный множитель 2 в выражении (5.93) и всех последующих выражениях. В результате множитель 1/2 в (5.100) сокращается и мы приходим к выражению (5.88).

Глава 6.

Электроны и фононы

6.1. Гамильтониан фононов. Диаграммная техника

Рассмотрим взаимодействие электронов с фононами. Фононы представляют собой кванты колебаний кристаллической решетки. Различают два основных типа фононов — *акустические* и *оптические*. Отличие между ними заключается в том, что частота акустических фононов обращается в нуль при $\mathbf{k} = 0$, а частота оптических фононов положительна при всех $\mathbf{k}$. Акустические фононы существуют во всех кристаллах, поскольку звук может распространяться в любой упругой среде. Оптические же фононы имеются только в кристаллах, содержащих более одного атома в элементарной ячейке.

Для описания закона дисперсии акустических фононов $\omega(\mathbf{k})$ часто пользуются так называемой моделью Дебая. В этой модели закон дисперсии принимается равным $\omega_0(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$ при всех $|\mathbf{k}| < k_D$, где величина k_D выбирается так, чтобы объем шара радиуса k_D давал правильное число колебательных состояний на единицу объема: $(4\pi/3)k_D^3 = (2\pi)^3 v^{-1}$, где v — объем элементарной ячейки кристалла. Аналогично, оптические фононы описываются моделью Эйнштейна, в которой частота фононов полагается не зависящей от волнового вектора: $\omega_0(\mathbf{k}) = \Omega_0 = \mathrm{const}$, причем $|\mathbf{k}| < k_D$ Пример двухкомпонентного кристалла, в котором имеются как акустические, так и оптические фононы был рассмотрен в задаче 1, где, в частности, было показано, что дисперсия оптических фононов исчезает при сильном отличии масс атомов.

Для квантовомеханического описания фононов вводятся операторы смещения решетки $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$ и плотности импульса решетки $\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$. (Для определенности мы будем говорить об акустических фононах.) Операторы $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$ и $\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t)$ могут быть стандартным образом записаны через канонические бозе-операторы рождения и уничтожения фононов $b_{\mathbf{k}}^+$ и $b_{\mathbf{k}}$:

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha}}{\sqrt{2V\rho\,\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})}} \left[b_{\mathbf{k}\alpha}\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t} + b_{\mathbf{k}\alpha}^+\, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t} \right], \tag{6.1}$$

$$\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},\alpha} i\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha} \sqrt{\frac{\rho\,\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})}{2V}} \left[b_{\mathbf{k}\alpha}^+\, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t} - b_{\mathbf{k}\alpha}\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k})t} \right], \tag{6.2}$$

где ρ, V — плотность и объем кристалла, а $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha}$ — вектор поляризации фонона. Индекс α нумерует нормальные моды кристалла [1]. Операторы рождения и уничтожения с противоположными $\mathbf{k}$ равны: $b_{-\mathbf{k}\alpha} = b^+_{\mathbf{k}\alpha}$. (Это следует из вещественности $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$ и $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$.)

Введенные операторы подчиняются следующим коммутационным соотношениям. Коммутаторы бозе-операторов $b_\mathbf{k}$ и $b^+_\mathbf{k}$ канонические: $[b_{\mathbf{k}\alpha}, b^+_{\mathbf{k}'\alpha'}] = (2\pi)^3 V\,\delta_{\alpha\alpha'}\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$. Нормировочные множители в определениях (6.1) и (6.2) выбраны так, что коммутационные соотношения для операторов $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$ и $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$, следующие из (6.1) и (6.2), имеют вид

$$[\widehat{u}_\alpha(\mathbf{r},t), \widehat{p}_\beta(\mathbf{r}',t')] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,. \tag{6.3}$$

Это в точности соответствует скобкам Пуассона соответствующих классических величин в теории упругости сплошной среды.

Гамильтониан фононов имеет следующий вид:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \int \left((1/2\rho)\,\widehat{\mathbf{p}}^2 + (\rho c^2/2)\,\widehat{\mathbf{u}}^2\right) d^3\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar\omega_{0,\alpha}(\mathbf{k}) \left(b^+_\mathbf{k} b_\mathbf{k} + 1/2\right) \tag{6.4}$$

Нетрудно видеть, что гамильтониан (6.4) приводит к динамике операторов $\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$ и $\widehat{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)$, заданной соотношениями (6.1) и (6.2).

Взаимодействие фононов и электронов является электрическим по своей природе. Колебания решетки приводят к отклонению электрического поля ионов, действующего на электроны, от своего среднего значения. Потенциал возникающего добавочного поля принято называть *деформационным потенциалом.* В отсутствие экранировки кулоновские силы являются дальнодействующими и взаимодействие электронов с фононами оказывается существенно нелокальным. Такая ситуация имеет место для взаимодействия электронов с оптическими фононами. Характер зависимости деформационного потенциала от волновых векторов электронов и фононов определяется симметрией кристаллической решетки.

В отличие от взаимодействия с оптическими фононами, деформационный потенциал акустических фононов обычно является локальным. Дело в том, что при акустических колебаниях решетки с малыми $\mathbf{k}$ смещения соседних атомов практически одинаковы (см. задачу 1). Вследствие этого, электрическая поляризация, возникающая при акустических колебаниях, оказывается пропорциональной градиенту деформации решетки: $\mathbf{P}(\mathbf{r}) \approx \nabla\,\mathrm{div}\,\mathbf{u}(\mathbf{r})$. Поэтому потенциал электрического поля поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ оказывается пропорциональным деформации решетки: $U_{\text{деф}}(\mathbf{r}) \approx \mathrm{div}\,\mathbf{u}(\mathbf{r})$.

Взаимодействие электронов с акустическими фононами принято рассматривать с помощью упрощенной модели, в которой пренебрегается взаимодействием с поперечными акустическими модами, имеющими векторы поляризации $\mathbf{e}_\mathbf{k} \perp \mathbf{k}$. Оказывается удобным выразить деформационный потенциал через поле

$$\widehat{\varphi}(\mathbf{r},t) = \sum_\mathbf{k} \sqrt{\omega_0(\mathbf{k})/2V}\,\left\{i\,\widehat{b}_{\mathbf{k},\parallel}\,e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}-i\omega_0(\mathbf{k})t} - i\,\widehat{b}^+_{\mathbf{k},\parallel}\,e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}+i\omega_0(\mathbf{k})t}\right\}\,. \tag{6.5}$$

[1] В дальнейшем мы будем рассматривать главным образом продольные колебания, для которых $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\alpha} \parallel \mathbf{k}$.

Для дебаевских фононов с законом дисперсии $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$ имеет место равенство $\widehat{\varphi}(\mathbf{r},t) = c\sqrt{\rho}\,\mathrm{div}\,\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r},t)$. (Поэтому в атомных единицах $\varphi(\mathbf{r}) \approx \mathrm{div}\,\mathbf{u}(\mathbf{r})$.) Деформационный потенциал акустических фононов может быть записан как $U_{\text{деф}}(\mathbf{r}) = g\widehat{\varphi}(\mathbf{r})$, где g — константа электрон-фононного взаимодействия.

В описанной модели гамильтониан взаимодействия электронов с фононами записывается через операторы поля (6.5) следующим образом:

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = g\int \widehat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\,\widehat{\psi}(\mathbf{r})\,\widehat{\varphi}(\mathbf{r})\,d^3r \tag{6.6}$$

(так называемый *гамильтониан Фрёлиха*). Хотя из сделанных оценок следует, что $g \approx 1$ в атомных единицах, надо иметь в виду что сила электрон-фононного взаимодействия может весьма сильно варьироваться от одной системы к другой.

Диаграммная техника строится с помощью функции Грина фононов, определенной следующим образом:

$$D(x,x') = -i\langle \mathrm{T}\,\widehat{\varphi}(x)\,\widehat{\varphi}(x')\rangle\,. \tag{6.7}$$

В отсутствие взаимодействия функция Грина $D(\omega,\,\mathbf{k})$ есть

$$D_0(\omega,\mathbf{k}) = \frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i0}\,. \tag{6.8}$$

Правила диаграммной техники для электронов и фононов почти такие же, как и для случая двухчастичного взаимодействия:

1) Все диаграммы строятся из двух элементов: простых линий, описывающих распространение электронов, и волнистых, описывающих распространение фононов.

2) Две электронных и одна фононная линии соединяются в вершинах.

3) n–му порядку теории возмущений соответствуют диаграммы с $2n$ вершинами.

4) Каждой электронной линии соответствует множитель $G_0(x-x')$ (x – начальная точка, x' – конечная). Каждой фононной — множитель $D_0(x-x')$.

5) Выражение, соответствующее данной диаграмме, следует проинтегрировать по координатам ее вершин. Каждой вершине соответствует множитель g.

6) Получившийся ответ следует умножить на $i^n\,(-1)^F$, где n — число волнистых линий, а F — число замкнутых петель, отвечающих ферми-частицам.

Вычислив собственно-энергетическую часть функции Грина электронов, можно определить спектр электронов с учетом электрон-фононного взаимодействия. Для того чтобы аналогичным образом найти спектр фононов, нужно рассмотреть полюса фононной функции Грина $D(\omega,\mathbf{k})$. Как и для функции Грина электронов $G(\varepsilon,\mathbf{p})$, для фононной функции Грина можно проделать анализ, описанный в п. 4.1.1, выделить собственно-энергетическую часть и провести суммирование диаграмм с помощью уравнения Дайсона. Собственно-энергетическая часть фононов обычно называется *поляризационным оператором* и обозначается через $\Pi(\omega, \mathbf{k})$. Поляризационный оператор $\Pi(\omega, \mathbf{k})$ есть сумма диаграмм, изображенных на рис. 6.1.

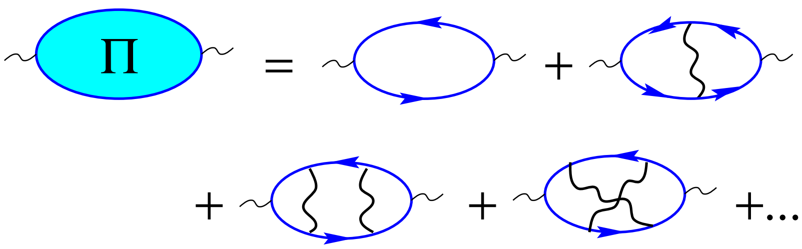


Рис. 6.1

Уравнение Дайсона для функции Грина фононов выглядит аналогично уравнению (4.9):

$$D = D_0 + D_0 \,\Pi\, D \tag{6.9}$$

и решается стандартным образом:

$$D^{-1}(\omega, \mathbf{k}) = D_0^{-1}(\omega, \mathbf{k}) - \Pi(\omega, \mathbf{k})\,. \tag{6.10}$$

Поэтому спектр фононов определяется уравнением

$$D_0^{-1}(\omega(\mathbf{k}), \mathbf{k}) = \Pi(\omega(\mathbf{k}), \mathbf{k})\,. \tag{6.11}$$

Вещественная часть $\omega(\mathbf{k})$ определяет дисперсию фононов, а мнимая — их затухание из-за передачи энергии электронам.

При изучении эффектов электрон-фононного взаимодействия в металле оказывается удобным пользоваться безразмерной константой электрон-фононного взаимодействия $\zeta = g^2\nu_0$ ($\nu_0 = mp_0/2\pi^2\hbar^3$ — плотность электронных состояний без учета спинового вырождения). Оценка ζ из первых принципов дает значение $\zeta \sim 1$. Поэтому, казалось бы, решение задачи в общем виде, эквивалентное суммированию диаграмм произвольно высокого порядка, должно быть невозможным. Однако оказывается, что в задаче присутствует другой малый параметр, позволяющий найти решение без предположения о малости ζ. Этот параметр есть ω_D/ε_F ($\omega_D = ck_D$ — дебаевская частота), что по порядку величины равно $\sqrt{m/M}$, где m и M — массы электронов и ионов. Условие $\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$ означает, что ионы, ввиду их большой массы, двигаются намного медленнее, чем электроны. Поэтому электроны не могут раскачать решетку, вместо этого они просто подстраиваются под ее локальную конфигурацию. Другая интерпретация условия $\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$ — большое запаздывание фононов на временах порядка $\hbar/\varepsilon_F$.

Теория электрон-фононного взаимодействия в металле, использующая малый параметр $\omega_D/\varepsilon_F \ll 1$, называется *теорией Мигдала*. Упрощенно говоря, эта теория позволяет распространить идеи теории полярона (см. задачи 16,17,21,33) на случай электронной ферми–системы. Более формально, теория Мигдала представляет собой набор утверждений о свойствах гриновских функций, вытекающих из медленности динамики фононов по сравнению с динамикой электронов. В этой теории показывается, что перенормировки, хотя и велики, «не распространяются» из простых графиков в более сложные. Это проявляется в том, что нет обратного влияния перенормировки электронного спектра на фононы, а также в малости поправок к вершине электрон-фононного взаимодействия. Основные положения теории Мигдала сформулированы в задачах 29 – 31. Теория описывает влияние электрон–фононного взаимодействия в терминах перенормировки свойств квазичастиц (электронов и фононов). При этом не происходит какого-либо разрушения ферми-поверхности — утверждается, что картина невзаимодействующих квазичастиц остается справедливой.

В заключение следует сказать, что электрон-фононное взаимодействие — не такая простая вещь, как может показаться из вышеизложенного. Как известно, это взаимодействие приводит к образованию куперовских пар и к сверхпроводимости (см. гл. 10). Кроме того, в одномерном случае электрон-фононное взаимодействие приводит к образованию пайерлсовского диэлектрика (см. задачу 32). Как в случае сверхпроводящего, так и в случае диэлектрического состояний происходит полное «разрушение» ферми-поверхности, проявляющееся в исчезновении состояний с достаточно малыми энергиями. Поэтому, строго говоря, в присутствие электрон–фононного взаимодействия ферми-жидкость никогда не является устойчивым состоянием при нулевой температуре.

Литература: Вторично–квантованные операторы фононного поля определены в [1], § 7. Правила диаграммной техники для электрон–фононного взаимодействия приведены в [1], § 9. Весьма прозрачное изложение этих вопросов для модели оптических фононов содержится в [3], § 6.10. Теория электрон-фононного взаимодействия в металлах рассмотрена в [1], § 21, а также в [6], § 64, 65.

6.2. Задачи 28 – 33

Задача 28. (*Время жизни квазичастиц.*) Рассмотрим вырожденный электронный газ при $T = 0$, взаимодействующий с колебаниями решетки (см. задачи 16, 17). Найдите затухание квазичастицы с энергией $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$, вычислив собственно-энергетическую часть $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ в низшем порядке по взаимодействию. Затухание дается мнимой частью $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$.

Задача 29. (*Перенормировка спектра электронов.*) Изучите влияние электрон-фононного взаимодействия на спектр электронов. Найдите вещественную часть $\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ и убедитесь в том, что она зависит от ε и практически не зависит от $\mathbf{p}$.

Покажите, что $\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon)$ может быть велика только в небольшой по сравнению с ε_F области энергий $|\varepsilon|\leqslant\omega_D$ (мы отсчитываем энергию квазичастиц ε от уровня Ферми). Выразите плотность состояний через $\Sigma(\varepsilon)$ и покажите, что вблизи уровня Ферми электроны «утяжеляются», а плотность состояний — возрастает.

Задача 30. (*Теорема Мигдала — нет перенормировки вершины.*) Оцените поправку к вершине электрон-фононного взаимодействия (рис. 6.2). Покажите, что ее относительная величина порядка ω_D/ε_F.

Чтобы прояснить роль параметра ω_D/ε_F теории Мигдала, вычислите вершинную часть в смешанном «импульсно-временном» представлении, в котором функция Грина зависит от импульса и от времени.

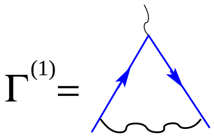


Рис. 6.2

Задача 31. (*Фононы в металле.*) Рассмотрите собственно-энергетическую часть $\Pi(\omega,k)$ фононной функции Грина, изображенную на рис. 6.3.

а) Получите формулу для перенормированной скорости звука:

$$c^2 = c_0^2(1-2\zeta)\,, \tag{6.12}$$

где $\zeta = g^2\nu_0$ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. (В металлах обычно параметр ζ не мал, но все же $1-2\zeta>0$.)

б) Рассматривая $\operatorname{Im}\Pi(\omega,k)$ при малых ω и k, определите длину затухания звука в металле. Как она зависит от частоты? Сравните с затуханием звука в газе.

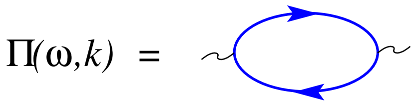


Рис. 6.3

Задача 32*. (*Пайерлсовская неустойчивость.*) Найдите $\Pi(\omega,k)$ (см. рис. 6.3) в одномерном случае. Получите логарифмическую особенность $\Pi(\omega,k)$ при $k=2p_0$. Вблизи этого волнового вектора частота фононов становится мнимой, что означает неустойчивость системы по отношению к какой-то перестройке. Что именно при этом происходит? В какое состояние переходит система?

Задача 33. (*Автолокализация полярона сильной связи.*) Рассмотрим электрон, взаимодействующий с упругой изотропной средой:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \int\left[-\frac{1}{2}\psi^+(\mathbf{r})\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \lambda\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})w(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\rho\dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}Kw^2(\mathbf{r})\right]d^Dr\,. \tag{6.13}$$

Здесь $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ — поле смещений среды, а $w(\mathbf{r}) = \nabla\mathbf{u}(\mathbf{r})$ — деформация среды. Мы используем классическое выражение $(\rho/2)\dot{\mathbf{u}}^2$ для кинетической энергии, поскольку нас будет интересовать случай сильного взаимодействия, когда смещение $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ достаточно велико. В этой ситуации поля $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ и $w(\mathbf{r})$ можно считать классическими. Более того, в духе адиабатического приближения можно считать, что деформация решетки следует за движением электрона, не имея какой-либо собственной динамики [2].

а) Рассмотрим ситуацию, когда электрон вместе с вызванной им деформацией среды $w(\mathbf{r})$ покоится (в этом случае $\dot{\mathbf{u}} = 0$), и найдем $w(\mathbf{r})$, минимизирующую энергию (6.13): $w(\mathbf{r}) = -(\lambda/K)|\psi(\mathbf{r})|^2$. Это выражение означает, что электрон деформирует решетку вокруг себя, причем деформация такова, что энергия электрона в его собственном поле $w(\mathbf{r})$ понижается. Если выигрыш энергии достаточно велик, то электрон «сам себе копает яму» и образует в ней связанное состояние.

Запишите уравнение Шредингера для волновой функции электрона $\psi(\mathbf{r})$, выразив потенциал через $\psi(\mathbf{r})$. Решение этого *нелинейного* уравнения легче всего получить в случае одного пространственного измерения. Найдите $\psi(\mathbf{r})$ в этом случае и определите выигрыш энергии за счет автолокализации. Обсудите, как размер локализованного состояния, энергия связи, и условие его существования зависят от величины константы связи λ и от размерности пространства.

б) Определим эффективную массу автолокализованного состояния полярона. [3] В приближении классической деформации (6.13) найдите энергию состояния, движущегося с постоянной скоростью $\mathbf{v}$, как функцию $\mathbf{v}$ и константы связи λ. Из найденной зависимости получите выражение для эффективной массы полярона. При какой величине взаимодействия λ справедливо использованное приближение сильной связи (т. е. классической деформации)?

6.3. Решения задач 28 – 33

28. Собственно-энергетическая часть дается диаграммой на рис. 4.10, в которой используется причинная функция Грина электрона в ферми-газе $G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) = (\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}} + i0 \operatorname{sign} \xi_{\mathbf{p}})^{-1}$. В задаче 16 эта же диаграмма рассматривалась для одного электрона, взаимодействующего с фононами. При этом была использована функция Грина электрона в пустом пространстве (см. (4.34)). Однако в задаче о ферми-газе эта функция не годится, поскольку она не учитывает, что электрон не может переходить в занятые состояния. Таким образом,

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{ig^2}{(2\pi)^4} \int \frac{c^2k^2}{\omega^2 - c^2k^2 + i0} \frac{d\omega\, d^3k}{\varepsilon - \omega - \xi_{\mathbf{p-k}} + i\,0 \operatorname{sign} \xi_{\mathbf{p-k}}} . \tag{6.14}$$

Основное отличие этого выражения от (4.34) заключается в способе обхода полюсов. Они находятся в точках $\omega_1 = \varepsilon - \xi_{\mathbf{p-k}} + i\,0 \operatorname{sign} \xi_{\mathbf{p-k}}$ и $\omega_{2,3} = \pm(ck - i\,0)$.

[2] Адиабатическое приближение для полярона сильной связи и теория автолокализации были впервые предложены в работе: S. I. Pekar, J. Phys. (U.S.S.R.), v. 10, p. 341 (1946); см. также: С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов, Гостехиздат, 1951.

[3] Л. Д. Ландау, С. И. Пекар, ЖЭТФ, т. 18, с. 419 (1948).

Замыкая контур интегрирования по ω так, чтобы внутрь него попал только один полюс из трех, перепишем правую часть выражения (6.14) следующим образом:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 c}{16\pi^3} \int\limits_{|\mathbf{k}|<k_D} \left(\frac{\theta(\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}})}{\varepsilon - ck - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} + i0} + \frac{\theta(\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}})}{\varepsilon + ck - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} - i0} \right) k\, d^3k\,. \tag{6.15}$$

Теперь воспользуемся стандартной заменой переменной в интеграле по d^3k, использованной в решении задачи 16. Перейдем к интегрированию по $|\mathbf{k}|$ и $p_1 = |\mathbf{p} - \mathbf{k}|$ по формуле (4.38) (см. также [1], § 21, п. 3). В этих переменных выражение (6.15) для $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ можно переписать так:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 c}{8\pi^2 p} \int\limits_0^{k_D}\!\!\int \left(\frac{\theta(p_1 - p_0)}{\varepsilon - ck - \xi_{p_1} + i0} + \frac{\theta(p_0 - p_1)}{\varepsilon + ck - \xi_{p_1} - i0} \right) p_1 dp_1\, k^2 dk\,. \tag{6.16}$$

Область интегрирования по p_1 в (6.16) есть $|p - k| < p_1 < p + k$. Теперь удобно перейти от переменной интегрирования p_1 к переменной $\xi = p_1^2/2m - \varepsilon_F$:

$$\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 cm}{8\pi^2 p} \int\limits_0^{k_D}\!\!\int \left(\frac{\theta(\xi)}{\varepsilon - ck - \xi + i0} + \frac{\theta(-\xi)}{\varepsilon + ck - \xi - i0} \right) d\xi\, k^2 dk\,, \tag{6.17}$$

причем интеграл по ξ в (6.17) берется по области

$$(p-k)^2/2m - \varepsilon_F < \xi < (p+k)^2/2m - \varepsilon_F\,. \tag{6.18}$$

Вещественная часть $\Sigma(\varepsilon, p)$ будет вычислена в следующей задаче, здесь же ограничимся мнимой частью. Применяя известную формулу

$$\operatorname{Im} \frac{1}{x + i0} = -\pi\delta(x)\,, \tag{6.19}$$

получаем

$$\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon, p) = \frac{g^2 cm}{8\pi p} \int\!\!\int \left(\theta(-\xi)\delta(\varepsilon + ck - \xi) - \theta(\xi)\delta(\varepsilon - ck - \xi)\right) d\xi k^2 dk\,. \tag{6.20}$$

Второе слагаемое (оно отлично от нуля при $\varepsilon > 0$) дает время жизни электронных состояний, а первое (отличное от нуля при $\varepsilon < 0$) — дырочных.

До настоящего момента все преобразования были точными. Теперь обратим внимание на то, что при $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$ вероятность распада можно вычислять, интегрируя в (6.20) не по области (6.18), а просто по всем ξ. Дело в том, что сохранение энергии при распаде частицы с энергией ε на частицу с энергией ξ и фонона с энергией ck гарантирует соблюдение неравенств (6.18), поскольку $c \ll v_F$ и $\varepsilon \approx \xi_{\mathbf{p}}$.

В силу сказанного интеграл по ξ в (6.20) берем по $-\infty < \xi < \infty$:

$$\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon, p) = \frac{g^2 c}{8\pi v_F} \int\limits_0^{k_D} \left(\theta(-\varepsilon - ck) - \theta(\varepsilon - ck)\right)\, k^2\, dk\,. \tag{6.21}$$

При переходе от (6.20) к (6.21) мы заменили в коэффициенте p на p_0.

Интегрируя по k в выражении (6.21), получаем

$$\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon,p) = -\frac{g^2c}{8\pi v_F}\,\operatorname{sign}\varepsilon\int\limits_0^{k_\varepsilon} k^2\,dk = -\operatorname{sign}\varepsilon\,\frac{g^2ck_\varepsilon^3}{24\pi v_F}\,,\ k_\varepsilon = \min[k_D, |\varepsilon|/c] \tag{6.22}$$

Найденная мнимая часть $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon,p)$ при $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$ является функцией одного только ε, и не зависит от p.

Переходя к безразмерной константе ζ электрон-фононного взаимодействия, $g^2 = \zeta/\nu_0$, получаем

$$\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon) = -\frac{\zeta\pi}{12p_0^2c^2}\,\operatorname{sign}\varepsilon\begin{cases}|\varepsilon|^3 & \text{при } |\varepsilon| < \omega_D\ ,\\ \omega_D^3 & \text{при } |\varepsilon| > \omega_D.\end{cases} \tag{6.23}$$

То обстоятельство, что $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon)$ оказалась нечетной функцией ε, является следствием электрон-дырочной симметрии, имеющей место при $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$.

Обратим внимание на то, что при малых энергиях

$$\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon) \ll \varepsilon\,, \tag{6.24}$$

т. е. время жизни квазичастицы с энергией вблизи уровня Ферми очень велико по сравнению с $\hbar/\varepsilon$, и растет при уменьшении энергии быстрее, чем ε^{-1}. Это означает, что электрон-фононное взаимодействие не разрушает ферми-жидкостную картину.

Зависимость $\operatorname{Im}\Sigma(\varepsilon < \omega_D) \sim \varepsilon^3$ можно объяснить качественно. Вероятность испускания электроном фонона с заданным волновым вектором k пропорциональна k, поскольку оператор электрон-фононного взаимодействия пропорционален градиенту смещения решетки (иными словами, фонон с $k = 0$ не должен испускаться вообще — это просто трансляция кристалла, как целого). При этом, однако, если $\varepsilon < \omega_D$, то электрон не может испускать фононы с произвольно большими k. Дело в том, что испустив фонон с большой энергией, электрон перешел бы в состояние с энергией, меньшей ε_F. Но такие состояния заняты, и перейти в них нельзя. По этой причине электрон будет испускать только фононы с волновыми векторами $k \leqslant \varepsilon/c$. При этом число конечных состояний — порядка площади поверхности сферы радиуса k. (Именно площади, а не объема — из-за законов сохранения!) Перемножая вероятность испускания фонона и число конечных состояний, получаем для вероятности распада $\gamma \sim \varepsilon^3$.

Таким образом, в ферми-системе вероятности процессов рассеяния при малых энергиях сильно уменьшаются. Это означает, что вблизи ферми-поверхности можно говорить о хорошо определенных квазичастицах. Большие времена жизни квазичастиц — ключевое свойство для обоснования теории ферми-жидкости.

Результат (6.23) в случае $\varepsilon > \omega_D$ также можно понять с помощью качественных соображений. При $\varepsilon > \omega_D$ электрон способен испускать фононы с импульсами вплоть до k_D, оставаясь снаружи ферми-сферы. Поэтому вероятность распада определяется фононами с $k \approx k_D$ и не зависит от ε. Конечные состояния электрона лежат в тонком сферическом слое, имеющем толщину порядка $\omega_D \ll \varepsilon_F$.

Нетрудно видеть, что даже при электрон-фононном взаимодействии $\zeta \sim 1$ вероятность распада γ сравнивается с ε только при $\varepsilon \approx \omega_D$.

29. В задаче 28 было получено выражение (6.17) для $\Sigma(\varepsilon, p)$ и вычислена его мнимая часть. Рассмотрим теперь вещественную часть $\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon, p)$ и найдем перенормировку спектра квазичастиц. Запишем вещественную часть выражения (6.17) в виде

$$\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2 cm}{8\pi^2 |\mathbf{p}|} \int\limits_0^{k_D} I(k)\ k^2\, dk\,, \tag{6.25}$$

где интеграл

$$I(k) = \int\limits_{\xi_{\min}}^{\xi_{\max}} \left[\frac{\theta(\xi)}{\varepsilon - ck - \xi} + \frac{\theta(-\xi)}{\varepsilon + ck - \xi}\right] d\xi \tag{6.26}$$

понимается в смысле главного значения, а область интегрирования по ξ дается условием (6.18).

Интегрирование по ξ дает

$$I(k) = \ln\left|\frac{\varepsilon - ck}{\varepsilon - ck - \xi_{\max}}\right| + \ln\left|\frac{\varepsilon + ck - \xi_{\min}}{\varepsilon + ck}\right|. \tag{6.27}$$

Это выражение нам будет удобно представить в таком виде:

$$I(k) = \ln\left|\frac{\varepsilon - ck}{\varepsilon + ck}\right| + \ln\left|\frac{\varepsilon + ck - \xi_{\min}}{\varepsilon - ck - \xi_{\max}}\right|. \tag{6.28}$$

Первое слагаемое в (6.28) после интегрирования по $k < k_D$ дает вклад в $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$, существенно зависящий от ε в области $|\varepsilon| \leqslant \omega_D$. Зависимость же этого вклада от $\mathbf{p}$, возникающая благодаря коэффициенту $|\mathbf{p}|^{-1}$ в (6.25), — довольно слабая (величина (6.25) чувствительна только к большим изменениям $\mathbf{p}$ порядка p_0).

В то же время второе слагаемое в выражении (6.28) дает «регулярный» вклад в $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$, слабо меняющийся как функция ε и p при изменениях $|\delta\varepsilon| \leqslant \varepsilon_F$, $|\delta\mathbf{p}| \leqslant p_0$. Чтобы в этом убедиться, заметим, что $ck \ll |\xi_{\min}|, \xi_{\max}$, и поэтому во втором логарифме в (6.28) можно пренебречь ck по сравнению с $\xi_{\min}$, $\xi_{\max}$.

Имея это в виду, представим собственно-энергетическую часть в виде $\Sigma_{\text{особ}}(\varepsilon) + \Sigma_{\text{рег}}$ и, имея в виду малые $|\varepsilon| \ll \varepsilon_F$ и $|\mathbf{p}|$ близкие к p_0, включим $\Sigma_{\text{рег}}$ в перенормировку затравочных химпотенциала $\mu = E_F$ и скорости $v_F = p_0/m$.

Таким образом, получаем

$$\operatorname{Re}\Sigma(\varepsilon) \ = \ \operatorname{Re}\Sigma_{\text{особ}}(\varepsilon) \ = \ \frac{g^2 c}{8\pi^2 v_F} \int\limits_0^{k_D} \ln\left|\frac{\varepsilon - ck}{\varepsilon + ck}\right| k^2 dk\,. \tag{6.29}$$

Обратим внимание на характерное свойство электрон-фононной собственно–энергетической части — независимость от импульса p электрона. Физическая причина этого — медленность фононов, приводящая к тому, что испущенный электроном фонон мгновенно отстает. В результате поглощение и испускание фонона становятся локальными процессами.

Интеграл в выражении (6.29) нетрудно вычислить. Однако поскольку получающееся выражение достаточно громоздко, нам будет более удобно рассмотреть предельные случаи $\varepsilon \ll \omega_D$ и $\varepsilon \gg \omega_D$.

А. При $\varepsilon \ll \omega_D$ можно разложить логарифм в (6.29), считая $\varepsilon \ll ck$:

$$\mathrm{Re}\,\Sigma(\varepsilon) = -\frac{2g^2\varepsilon}{8\pi^2 v_F}\int\limits_0^{k_D} k\,dk = -\frac{g^2k_D^2}{8\pi^2 v_F}\varepsilon = -b\,\varepsilon\,, \quad b = \zeta k_D^2/4p_0^2\,. \tag{6.30}$$

Б. При $\varepsilon \gg \omega_D$, напротив, имеем $\varepsilon \gg ck$, и снова разлагаем логарифм в (6.29):

$$\mathrm{Re}\,\Sigma(\varepsilon) = -\frac{g^2c^2}{8\pi^2 v_F}\int\limits_0^{k_D}\frac{k^3\,dk}{\varepsilon} = -\frac{g^2c^2k_D^4}{32\pi^2 v_F\,\varepsilon} = -\frac{b\,\omega_D^2}{4\varepsilon}\,. \tag{6.31}$$

Экстраполируя полученные выражения в область $\varepsilon \approx \omega_D$, можно сделать вывод, что в этой области возрастание $\mathrm{Re}\,\Sigma(\varepsilon)$ сменяется убыванием, т. е. $\mathrm{Re}\,\Sigma(\varepsilon)$ имеет там экстремум.

Выпишем теперь перенормированную функцию Грина. При $\varepsilon \ll \omega_D$ она имеет следующий вид:

$$G(\varepsilon,p) = \frac{1}{(1+b)\varepsilon - \xi_{\mathbf{p}} + i\gamma(\varepsilon)}\,, \tag{6.32}$$

где $\gamma(\varepsilon)$ дается выражением (6.23). При интересующих нас $\varepsilon \ll \omega_D$ затухание $\gamma(\varepsilon) \ll \varepsilon$.

Сравним полученное выражение (6.32) с определением (4.14) квазичастичной функции Грина. Видим, что амплитуда функции Грина (6.32), даваемая величиной вычета в полюсе, есть $Z = 1/(1+b)$. Закон же дисперсии квазичастиц, согласно (6.32), имеет вид

$$\varepsilon = \xi_{\mathbf{p}}/(1+b)\,. \tag{6.33}$$

Отсюда находим перенормировку эффективной массы:

$$m^* = (1+b)m\,. \tag{6.34}$$

Видно, что электрон действительно «утяжеляется» (ибо он вынужден тащить за собой фононное «облако»). Следовательно, плотность состояний, пропорциональная эффективной массе, увеличивается. Обратим внимание на то, что при электрон-фононном взаимодействии $\zeta \sim 1$ величина b, определяющая величину перенормировки, оказывается порядка единицы.

Перенормировка плотности состояний вблизи поверхности Ферми имеет простое качественное объяснение. Чем выше энергия электрона по сравнению с уровнем Ферми, тем более активно этот электрон испускает фононы (как видно из решения предыдущей задачи). В результате энергия электрона уменьшается, и он «прижимается» к поверхности Ферми. (Эти рассуждения немного неточны, поскольку при $\varepsilon \ll \omega_D$ вклад в $\Sigma(\varepsilon)$ дают, главным образом, не реальные, а виртуальные процессы. Поэтому следовало бы говорить об испускании и поглощении виртуальных фононов.)

30. Запишем выражение для поправки к вершинной части электрон–фононного взаимодействия, соответствующее диаграмме на рис. 6.2:

$$\Gamma^{(1)} = -g^3 \int G(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1) G(\varepsilon_1 + \omega, \mathbf{p}_1 + \mathbf{k}) D(\varepsilon - \varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \frac{d^3 p_1 \, d\varepsilon_1}{(2\pi)^4} \,. \tag{6.35}$$

Мы не будем вычислять $\Gamma^{(1)}$ точно, а попытаемся ее оценить по порядку величины. Вначале рассмотрим интеграл по ε_1. Полагая характерную передачу импульса порядка $k_D \approx p_0$, и учитывая, что $D(\varepsilon - \varepsilon_1)$ квадратично спадает при $|\varepsilon - \varepsilon_1| \gg \omega_D$, получаем, что основной вклад в интеграл дает область $|\varepsilon - \varepsilon_1| \approx \omega_D$. Оценив таким образом интеграл по ε_1, находим

$$\Gamma^{(1)} \approx \int \frac{g^3 \omega_D \, d^3 p_1}{(\varepsilon_1 - \xi_{\mathbf{p}_1} + i0 \operatorname{sign} \xi_1)(\varepsilon_1 - \omega - \xi_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{k}} + i0 \operatorname{sign} \xi_2)} \,. \tag{6.36}$$

Теперь рассмотрим интеграл по импульсу p_1. Характерная передача импульса — порядка $k_D \approx p_0$. Поэтому мы можем оценить знаменатели как ε_F, причем $d^3 p_1 \sim p_0^3$. Собирая все вместе, имеем

$$\Gamma^{(1)} \approx g^3 \omega_D \frac{p_0^2}{v} \, \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_F^2} \approx g^3 \frac{p_0^2}{v \varepsilon_F} \omega_D \,. \tag{6.37}$$

Относительная величина этой поправки

$$\frac{\Gamma^{(1)}}{g} \approx g^2 \frac{p_0^2}{v_F \varepsilon_F} \omega_D \approx \zeta \sqrt{\frac{m}{M}} \,. \tag{6.38}$$

Здесь использована известная оценка $\omega_D / \varepsilon_F \approx \sqrt{m/M}$, где m и M — масса электрона и иона соответственно. Электроны намного легче ионов, поэтому рассмотренная поправка к вершинной части пренебрежимо мала.

Приведенное рассуждение не является вполне строгим: оно оказывается ошибочным при $\omega \approx k v_F$, $\omega \ll \omega_D$. В этом случае полюса функций Грина сближаются, и интеграл надо анализировать более аккуратно. Однако в большинстве задач эта область не важна, поскольку скорость звука c много меньше v_F.

Чтобы прояснить физический смысл полученного неравенства $\Gamma^{(1)} \ll g$, вычислим вершинную часть в смешанном «импульсно-временном представлении». Это позволит нам лучше проследить за ролью различных характерных времен. Нам потребуются функции Грина фонона и электрона. Сначала найдем

$$D(\mathbf{k}, t) = \int D(\omega, \mathbf{k}) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} = \frac{-ick}{2} e^{-ick|t|} \,. \tag{6.39}$$

Аналогично можно вычислить и электронную функцию Грина:

$$G(\mathbf{p},t) = -ie^{-i\xi_{\mathbf{p}}t}\begin{cases}\theta(\xi_{\mathbf{p}}) & \text{при } t>0\,,\\ \theta(-\xi_{\mathbf{p}}) & \text{при } t<0\,.\end{cases} \tag{6.40}$$

Обратим внимание на то, что $D(\mathbf{k},t)$ — более медленно меняющаяся функция времени, чем $G(\mathbf{p},t)$ (при импульсе $\mathbf{p}$, не слишком близком к ферми-поверхности).

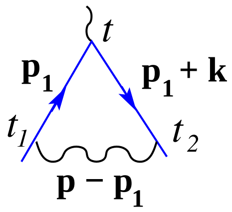


Рис. 6.4

На диаграмме, дающей поправку к вершине взаимодействия $\Gamma^{(1)}$, расставим импульсы и времена, как показано на рис. 6.4. Получаем следующее выражение:

$$\Gamma^{(1)} = -g^3\iint e^{-i\omega t}\,G(\mathbf{p}_1,t-t_1)\,G(\mathbf{p}_1+\mathbf{k},t_2-t)\,D(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1,t_1-t_2)\frac{d^3p_1dt}{(2\pi)^3}\,. \tag{6.41}$$

При $p_1\approx p_0$ электронные функции Грина меняются за времена порядка ε_F^{-1}. По этой причине $|t_1-t|\approx|t_2-t|\approx|t_1-t_2|\approx\varepsilon_F^{-1}$. Это означает, что фононный пропагатор берется при $t_1\approx t_2$. Поэтому он оказывается пропорционален $c|\mathbf{p}-\mathbf{p}_1|\approx\omega_D$, и, таким образом, возникает малый параметр ω_D/ε_F.

Иными словами, электроны быстро (за время порядка ε_F^{-1}) поглощают фонон, подстраиваясь под деформацию решетки. При этом они не успевают за счет своего движения снова «раскачать» решетку — на это требуется время порядка ω_D^{-1}. Это есть проявление адиабатичности движения ионов. В силу своей большой массы ионы движутся медленно и электроны всегда успевают подстроиться под их локальную конфигурацию.

Утверждение о малости вершинных поправок (теорема Мигдала) ценно тем, что позволяет оставить в диаграммном ряде наиболее существенные вклады и просуммировать их, не предполагая малости электрон-фононного взаимодействия. Однако не следует думать, что все фононные перенормировки малы и потому несущественны. Иногда они приводят к важным эффектам, один из которых — сверхпроводимость.

31. Запишем выражение для поляризационного оператора фононов, соответствующее диаграмме на рис. 6.3:

$$\Pi = -\frac{2ig^2}{(2\pi)^4}\int\frac{d\varepsilon\,d^3p}{(\varepsilon-\xi_{\mathbf{p}}+i0\,\mathrm{sign}\,\xi_{\mathbf{p}})(\varepsilon+\omega-\xi_{\mathbf{p+k}}+i0\,\mathrm{sign}\,\xi_{\mathbf{p+k}})} \tag{6.42}$$

(множитель 2 возникает из-за суммирования по спину). Заметим, что именно такое выражение было рассмотрено в задаче 24 а. Поэтому мы можем просто воспользоваться ответом (5.39), справедливым при $k \ll p_0$, $\omega \ll \varepsilon_F$:

$$\Pi(\omega, k) = -2g^2\nu_0 \left[1 - \frac{\omega}{2kv_F} \ln\left|\frac{\omega - kv_F}{\omega + kv_F}\right| + \frac{\pi i|\omega|}{2kv_F}\theta\left(1 - \frac{|\omega|}{kv_F}\right)\right]. \tag{6.43}$$

а) Функция Грина фононов определяется из уравнения Дайсона:

$$D^{-1}(\omega, k) = D_0^{-1}(\omega, k) - \Pi(\omega, k), \tag{6.44}$$

а спектр фононов — из уравнения $D^{-1}(\omega, k) = 0$. Поскольку скорость звука много меньше скорости Ферми, то нас итересует $\omega \ll kv_F$. В таком пределе поляризационный оператор есть просто

$$\Pi(\omega, k) \approx -2g^2\nu_0 = -2\zeta. \tag{6.45}$$

Поэтому функция Грина акустических фононов есть

$$D^{-1}(\omega, k) = D_0^{-1}(\omega, k) - \Pi(\omega, k) \approx \frac{\omega^2 - c_0^2k^2}{c_0^2k^2} + 2\zeta, \tag{6.46}$$

где c_0 — затравочная скорость звука. Получаем закон дисперсии фононов $\omega = ck$, где

$$c^2 = c_0^2(1 - 2\zeta). \tag{6.47}$$

Уменьшение частоты фонона вследствие взаимодействия с электронами можно объяснить тем, что электроны, быстро подстраиваясь под деформационный потенциал, скапливаются в его минимумах и тем самым понижают энергию системы.

б) Чтобы найти затухание фононов, рассмотрим мнимую часть поляризационного оператора:

$$\operatorname{Im}\Pi(\omega, k) = -\pi\zeta\,|\omega|/(kv_F). \tag{6.48}$$

Подставляя в уравнение Дайсона (6.44) $\omega = ck + i\gamma$, получаем

$$\gamma = \frac{\pi}{2}\zeta\frac{c^2}{v_F}k = \frac{\pi}{2}\zeta\frac{c}{v_F}\omega. \tag{6.49}$$

Хотя затухание и оказывается пропорциональным частоте, оно все же мало по сравнению с ω по параметру $c/v_F \approx \sqrt{m/M}$.

Сравним найденный результат (6.49) с затуханием звука в классической гидродинамике. В обычных жидкостях и газах затухание звука по порядку величины равно

$$\gamma \approx \eta\omega^2/\rho c^3, \tag{6.50}$$

где η, ρ — вязкость и плотность среды. Поэтому можно сказать, что «эффективная вязкость» электронного газа растет с уменьшением частоты:

$$\eta_{\text{эл}}(\omega) \sim \omega^{-1}. \tag{6.51}$$

Физически, большая эффективная вязкость электронного газа связана с высокой плотностью электрон-дырочных возбуждений с энергией $\omega < c|\mathbf{k}|$. Именно такие пары возбуждаются звуковой волной.

32. В размерности $D = 1$ поляризационный оператор, соответствующий рис. 6.3, равен

$$\Pi(\omega, k) = -2ig^2 \int G(p, \varepsilon)\, G(p+k, \varepsilon+\omega) \frac{dp\, d\varepsilon}{(2\pi)^2} \tag{6.52}$$

(множитель 2 учитывает спин). Вычисляя интеграл по ε, получаем

$$\Pi(\omega, k) = -\frac{g^2}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{(n(\xi_p) - n(\xi_{p+k}))\, dp}{\omega - \xi_{p+k} + \xi_p + i0\, \lambda_{p,k}}\,, \quad \lambda_{p,k} = \operatorname{sign} \xi_{p+k} - \operatorname{sign} \xi_p\,. \tag{6.53}$$

Интеграл (6.53) дается суммой вкладов двух областей, в которых разность $n(\xi_p) - n(\xi_{p+k})$ отлична от нуля:

А: $\xi_p > 0$, $\xi_{p+k} < 0$; **Б**: $\xi_p < 0$, $\xi_{p+k} > 0$.

Рассмотрим $k > 0$. В этом случае области **А** и **Б** есть

А: $-p_0 - k < p < -p_0$, **Б**: $p_0 - k < p_0 < p_0$.

Поэтому можно переписать (6.53) следующим образом:

$$\Pi(\omega, k) = -\frac{g^2}{\pi} \int\limits_{-p_0-k}^{-p_0} \frac{dp}{\omega - k^2/2m - pk/m - i0} \;+\; \frac{g^2}{\pi} \int\limits_{p_0-k}^{p_0} \frac{dp}{\omega - k^2/2m - pk/m + i0}\,. \tag{6.54}$$

Интеграл по p легко вычисляется и равен

$$\Pi(\omega, k) = \frac{mg^2}{\pi k} \ln X\,, \quad \text{где} \;\; X = \frac{\left(\dfrac{k^2}{2m} - \dfrac{kp_0}{m} - \omega + i0\right)\left(\dfrac{k^2}{2m} - \dfrac{kp_0}{m} + \omega + i0\right)}{\left(\dfrac{k^2}{2m} + \dfrac{kp_0}{m} + \omega - i0\right)\left(\dfrac{k^2}{2m} + \dfrac{kp_0}{m} - \omega - i0\right)}\,. \tag{6.55}$$

Рассмотрим поляризационный оператор (6.55) при $k = 2p_0 + x$, $\omega = 0$:

$$\Pi(\omega = 0, k = 2p_0 + x) = -\frac{mg^2}{\pi p_0} \ln \frac{p_0}{|x|}\,. \tag{6.56}$$

Это выражение логарифмически расходится при $k = 2p_0$.

Найденная логарифмическая особенность $\Pi(\omega, k)$ проявляется в спектре фононов. Запишем дисперсионное уравнение

$$D^{-1}(\omega, k) = D_0^{-1}(\omega, k) - \Pi(\omega, k)\,. \tag{6.57}$$

Нас интересуют значения k вблизи $k = 2p_0$ и малые ω. В этой области дисперсионное уравнение принимает такой вид

$$\frac{\omega^2 - \omega_{2p_0}^2}{\omega_{2p_0}^2} + \frac{mg^2}{\pi p_0} \ln \frac{p_0}{|k - 2p_0|} = 0\,, \tag{6.58}$$

Строго говоря, следовало бы использовать $\Pi(\omega, k = 2p_0)$ при $\omega \neq 0$. Это, однако, не меняет качественных выводов. Получаем закон дисперсии

$$\omega^2 = \omega_{2p_0}^2 \left(1 - \frac{mg^2}{\pi p_0} \ln \frac{p_0}{|k - 2p_0|}\right) . \tag{6.59}$$

При k достаточно близком к $2p_0$ второй член в правой части (6.59) превосходит первый, и потому частота фононов становится мнимой. Это означает, что в системе возникает неустойчивость вблизи волнового вектора $k = 2p_0$ — кристаллическая решетка стремится деформироваться. На первый взгляд это кажется несколько странным — ведь деформация решетки требует энергии. Однако, оказывается, что из-за взаимодействия с электронами деформация становится энергетически выгодной. Неустойчивость одномерного металла по отношению к образованию модуляции плотности с периодом π/p_0 приводит к так называемому переходу Пайерлса. Равновесная амплитуда возникающей модуляции определяется балансом электронной и упругой энергии (см. разд. 6.4).

Чтобы разобраться в происхождении пайерлсовской деформации и выяснить, чем выделен волновой вектор $2p_0$, предположим, что каким-то образом возникла спонтанная модуляция решетки с волновым вектором Q. Что происходит при этом с электронами? На них действует деформационный потенциал, период которого есть $2\pi/Q$. Как известно, в периодическом потенциале электронный спектр приобретает зонную структуру, и в нем открываются щели. Их появление связано с вырождением электронного спектра: состояния с импульсами p и $-p$ в отсутствие потенциала имеют одинаковую энергию. Если внешний потенциал их перемешивает, то это вырождение снимается, и уровни расщепляются. Потенциал с периодом $2\pi/Q$ в низшем порядке теории возмущений смешивает состояние с импульсом p с состояниями с импульсами $p \pm Q$. Вырождение происходит при $p = \pm Q/2$. Именно при этих значениях p в спектре и открывается самая большая щель (рис. 6.5).

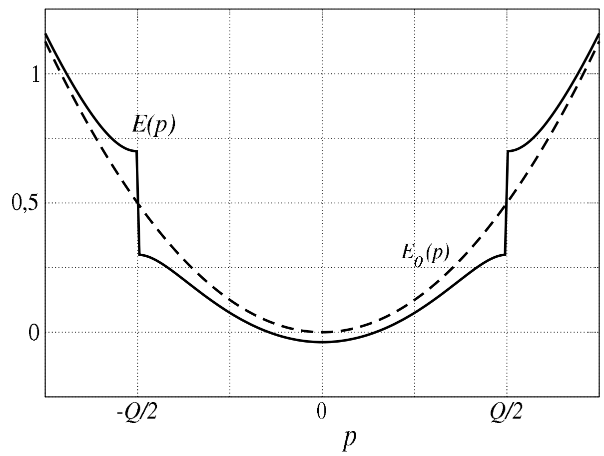


Рис. 6.5

При образовании щели состояния над ней выталкиваются вверх по шкале энергий, а под ней — вниз. Как при этом изменяется полная энергия электронов, зависит от положения уровня Ферми ε_F по отношению к щели. Если ε_F лежит существенно ниже, чем щель, то энергии состояний под ним почти никак не изменяются. А если ε_F лежит выше, чем щель, то, хотя энергии некоторых электронов изменятся сильно, но, поскольку состояния выталкиваются из щели вверх и вниз симметрично, *суммарная* энергия меняется незначительно. Однако ситуация станет совершенно иной, если уровень Ферми находится в точности там, где открывается щель. Тогда все занятые состояния выталкиваются из щели вниз, и энергия электронного газа понижается. Это происходит, если выполнено условие $p_0 = Q/2$.

Таким образом, модуляция решетки с волновым вектором $Q = 2p_0$ может привести к существенному понижению энергии системы. Наше вычисление, предсказывающее неустойчивость, означает, что выигрыш в энергии решетки за счет взаимодействия с электронами превосходит энергию упругой деформации, что и приводит к неустойчивости. В результате образуется состояние, в котором смещение решетки и плотность электронов модулированы с периодом π/p_0. Такое состояние называется *волной зарядовой плотности.*

Пайерлсовскую неустойчивость можно также назвать «кооперативным эффектом Яна–Теллера». Напомним, что эффект Яна–Теллера в молекулах состоит в том, что симметричные конфигурации молекул оказываются неустойчивыми. Деформация молекулы, разрушающая симметрию, снимает вырождение электронных уровней, и если при этом вырожденный уровень был не полностью заполнен, то это приводит к понижению энергии молекулы. В эффекте Пайерлса трансляционно–инвариантная конфигурация решетки неустойчива по аналогичным причинам.

33 а. Рассмотрим случай одного измерения, $D = 1$. Мы предполагаем, что система покоится, т. е. $\dot{\mathbf{u}} = 0$. Минимизируя в этом случае энергию (6.13) по отношению к деформации $w(x)$, находим связь $w(x)$ с плотностью: $w(x) = -(\lambda/K)\,|\psi(x)|^2$. Подставив это выражение в деформационный потенциал, действующий на электрон, приходим к нелинейному уравнению Шредингера:

$$-\frac{1}{2}\psi'' - \frac{\lambda^2}{K}|\psi|^2\psi = E\psi\,. \tag{6.60}$$

Ищем солитонное решение в виде

$$\psi(x) = \frac{A}{\operatorname{ch} Bx}\,. \tag{6.61}$$

Находим $B^2 = \lambda^2 A^2/K,\ E = -B^2/2$. Недостающую связь A и B получаем из условия нормировки:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x)dx = \frac{2A^2}{B} = 1\,. \tag{6.62}$$

Это дает энергию связи $E_0 = -(\lambda^2/K)^2/8$ и размер локализованного состояния $B^{-1} = 2K/\lambda^2$.

Найдем энергию деформации

$$E_{\text{упр}} = \frac{K}{2}\int w^2(x)dx = \frac{\lambda^2}{2K}\int \psi^4(x)dx = \frac{g^4}{12K^2}\,. \tag{6.63}$$

Полная энергия отрицательна:

$$E_{\text{полн}} = E_0 + E_{\text{упр}} = \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{8}\right)\frac{\lambda^4}{K^2} = -\frac{\lambda^4}{24K^2} \ < \ 0 \tag{6.64}$$

и поэтому образование локализованного состояния выгодно при сколь угодно малом λ.

При $D > 1$ все несколько сложнее. Решить задачу точно уже нельзя, но качественное поведение можно получить из «соображений размерности». Рассмотрим локализованное состояние электрона, сосредоточенное в области порядка a:

$$\psi(r) \approx a^{-D/2} f(r/a)\,, \tag{6.65}$$

где $f(r)$ — функция типа колокола размера порядка единицы. Эту функцию можно получить вариационным или каким-либо еще численным методом. Точный вид $f(r)$ нам не потребуется, но можно иметь в виду, например, функцию вида $f(r) = e^{-r^2}$. Найдем зависимость кинетической и упругой энергии от a:

$$E_{\text{кин}} = \frac{c_1}{a^2}\,, \quad E_{\text{упр}} = -\frac{c_2\lambda^2}{Ka^D}\,, \tag{6.66}$$

где $c_{1,2}$ — положительные константы порядка единицы. Для ответа на вопрос о локализации следует найти a, минимизирующее энергию

$$E_{\text{полн}} = \frac{c_1}{a^2} - \frac{c_2\lambda^2}{Ka^D}\,, \tag{6.67}$$

имея в виду, что это выражение применимо только при a, большем постоянной решетки a_0. Видим, что имеется критическое значение $\lambda_c \approx Ka_0^{D-2}$, такое, что при $\lambda < \lambda_c$ локализованное состояние невыгодно, а при $\lambda > \lambda_c$ оно образуется, причем сразу сжимается до размера порядка постоянной решетки.

33 б. Чтобы определить эффективную массу полярона, найдем энергию полярона, движущегося с постоянной скоростью $\mathbf{v}$. Движение полярона удобно рассмотреть в сопутствующей системе отсчета. Для волновой функции электрона преобразование Галилея дает

$$\psi(\mathbf{r},t) = \widetilde{\psi}(\mathbf{r}',t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(m\mathbf{v}\mathbf{r}' + \frac{m\mathbf{v}^2}{2}t\right)\right]\,, \tag{6.68}$$

где $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$ — координата в движущейся системе отсчета (см. задачу к § 17 [2]). Поскольку преобразование меняет только фазу $\psi(\mathbf{r},t)$, но не $|\psi|$, взаимодействие с решеткой $\lambda w(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})|^2$ в сопутствующей системе отсчета сохраняет свой вид, а из кинетической энергии электрона вычитается $m\mathbf{v}^2/2$.

Влияние движения на энергию решетки оказывается более существенным. Поскольку при переходе в движущуюся систему отсчета временная производная оказывается связанной с пространственной производной ($\partial_t = \partial_{t'} + \mathbf{v}\nabla_{\mathbf{r}'}$), скорость смещения среды в сопутствующей системе отсчета есть $\dot{u} = (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{u}$. Следовательно, плотность кинетической энергии системы равна $\rho((\mathbf{v}\nabla)\mathbf{u})^2/2$. Упругая же энергия зависит от деформации $w = \nabla\mathbf{u}$, и поэтому не меняется при движении. Физическая причина отличия кинетической энергии от нуля в том, что локализованная деформация, движущаяся с постоянной скоростью, раскачивает атомы решетки.

В размерности один получается плотность кинетической энергии $\rho\mathbf{v}^2w^2/2$, совпадающая по форме с плотностью упругой энергии $Kw^2/2$. Поэтому в данном случае уравнение для $\widetilde{\psi}$ будет иметь вид (6.60) с точностью до замены: $E \longrightarrow E - m\mathbf{v}^2/2$ и $K \longrightarrow K + \rho\mathbf{v}^2$. Используя результат (6.64) для энергии связи неподвижного полярона, получаем изменение энергии вследствие движения:

$$\Delta E(\mathbf{v}) = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} + \frac{\lambda^4}{24K^2} - \frac{\lambda^4}{24(K+\rho\mathbf{v}^2)^2}\,. \tag{6.69}$$

Раскладывая выражение (6.69) при малом $\mathbf{v}$, получаем массу полярона

$$m_* = m + \lambda^4\rho/(6K^3)\,. \tag{6.70}$$

Как видно из зависимости (6.69), приближение эффективной массы (6.70) применимо при скорости движения полярона много меньшей скорости звука, $v \ll c$.

В размерности $D > 1$, как уже отмечалось, задача об отыскании минимума энергии (6.13) и волновой функции автолокализованного состояния может быть решена только численно. Изменение энергии полярона в результате его движения рассматривается при $D > 1$ аналогично одномерному случаю. Для массы полярона при этом получается формула вида (6.70), в которой коэффициент $1/6$ заменяется на другое число, зависящее от размерности D и деталей взаимодействия на малых расстояниях.

Отметим, что масса полярона (6.70) может намного превосходить массу электрона. Например в случае, когда электрон-фононное взаимодействие не имеет никакой специфической малости, в атомных единицах $\lambda \sim 1$, $K \sim 1$, а $\rho \approx M/m$, где M — характерная масса иона решетки. При этом $m_* \approx M$. Разумеется в реальных полупроводниках масса полярона обычно не достигает массы иона, поскольку константа связи λ, как правило, не превосходит $1/10$, а поправка к массе в (6.70) пропорциональна λ^4.

Сравним перенормировку массы полярона сильной связи (6.70) с результатом $m_*/m = 1 + (4/3\pi^2)g^2m^2c\,\ln(k_D/mc)$ для полярона слабой связи, полученным в задаче 16 (см. выражение (4.45)). Прежде всего отметим, что константа связи λ в гамильтониане сильной связи (6.13) связана с константой связи g в гамильтониане Фрёлиха (6.6) следующим образом: $\lambda = gK^{1/2}$. Поэтому результат (6.70) можно записать в атомных единицах как $m_*/m = 1 + (g^2/c)^2/6$. Сравнивая эти два выражения для эффективной массы, видим, что переход из режима слабой связи в режим сильной связи происходит при относительно малой величине константы $g \ll 1$.

6.4. Эффект Пайерлса, теория среднего поля

Электрон-фононное взаимодействие в металле может приводить к двум различным, хотя в чем-то и родственным, неустойчивостям: пайерлсовской, переводящей металл в диэлектрическое состояние, и куперовской, делающей металл сверхпроводником (см. гл. 10). Эффектом Пайерлса (см. задачу 32) называется неустойчивость одномерной электрон-фононной системы, приводящая к образованию модуляции смещения решетки с волновым вектором $k = 2p_0$ (это соответствует периоду в пространстве, равному среднему расстоянию между электронами с одной проекцией спина). Из-за рассеяния электронов на периодическом деформационном потенциале с $k = 2p_0$ в окрестности уровня Ферми в спектре электронов открывается щель, величина которой пропорциональна амплитуде модуляции. Энергия заполненных состояний, находящихся под щелью, понижается на величину бо́льшую, чем затраченная системой при возникновении модуляции упругая энергия. Такой баланс энергии делает пайерлсовское состояние более выгодным по сравнению с исходным металлическим состоянием. Пайерлсовское состояние является диэлектриком, поскольку в нем отсутствуют электронные возбуждения с энергиями, меньшими величины щели в спектре. Пайерлсовская неустойчивость наиболее ярко выражена в одномерной системе, но встречается также и в реальных трехмерных системах, структура которых в том или ином смысле «квазиодномерна».

Цель этого раздела — изложить простую теорию, позволяющую обосновать описанную картину и выяснить некоторые интересные детали устройства пайерлсовского состояния. Мы ограничимся здесь случаем нулевой температуры (некоторые вопросы термодинамики перехода Пайерлса рассмотрены в задаче 39). По характеру применяемого приближения использованный ниже метод является так называемой *теорией среднего поля*, поскольку модуляция решетки, на фоне которой двигаются электроны и фононы, рассматривается в этой теории как статическая. При этом предполагается, что действующий на электроны деформационный потенциал флуктуирует относительно слабо. Такое приближение позволяет найти гриновские функции электронов и фононов и определить, как их закон дисперсии меняется при переходе в пайерлсовское состояние.

Начнем с того, что явно выделим область импульсов вблизи поверхности Ферми. Запишем для этого ψ-оператор в виде суммы вкладов частиц с энергиями вблизи E_F, движущихся направо и налево:

$$\psi(x) = \psi_1(x)\, e^{ip_0x} + \psi_2(x)\, e^{-ip_0x}\,, \tag{6.71}$$

где $\psi_i(x)$, $i = 1, 2$, предполагаются медленными функциями x. После этого гамильтониан свободных электронов принимает вид

$$\mathcal{H}_0 = \int \psi^+(x) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} - \frac{p_0^2}{2m} \right) \psi(x) dx \approx -iv_F \int \left(\psi_1^+(x) \frac{\partial \psi_1}{\partial x} - \psi_2^+(x) \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right) dx \quad (6.72)$$

Предположим теперь, что в системе возникла статическая модуляция смещения решетки $u(x) = u_0 \cos(2p_0 x + \varphi)$. При этом на электроны действует деформационный потенциал $U(x) = g\partial u/\partial x$. Соответствующий вклад в гамильтониан есть

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = \int U(x)\, \psi^+(x)\psi(x)\, dx \approx \Delta \int \left(\psi_1^+(x)\psi_2(x) + \text{h.c.} \right) dx\,, \qquad (6.73)$$

где $\Delta = gu_0 p_0 e^{i\varphi}$. Нам будет удобно воспользоваться матричной формой записи. Будем считать ψ двухкомпонентным вектором (его компоненты — ψ_1 и ψ_2). Тогда гамильтониан можно представить с помощью матрицы, действующей на этот вектор:

$$\widehat{H} = \begin{pmatrix} v_F \widehat{k} & \Delta \\ \Delta^* & -v_F \widehat{k} \end{pmatrix}. \qquad (6.74)$$

Здесь $\widehat{k} = -i\partial/\partial x$. Перейдя к импульсному представлению, нетрудно найти собственные значения и собственные векторы оператора (6.74):

$$\varepsilon_\pm(k) = \pm\sqrt{v_F^2 k^2 + \Delta^2}\,, \quad |\pm, k\rangle = \begin{pmatrix} u_\pm \\ -v_\pm \end{pmatrix}, \qquad (6.75)$$

где

$$u_\pm^2 = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{v_F k}{\sqrt{v_F^2 k^2 + \Delta^2}} \right), \quad v_\pm^2 = \frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{v_F k}{\sqrt{v_F^2 k^2 + \Delta^2}} \right). \qquad (6.76)$$

Таким образом, наш вывод о том, что в спектре возбуждений открывается щель, оказывается справедливым, причем величина щели есть $2|\Delta|$.

Используя найденные собственные состояния и их энергии (6.75), найдем изменение полной энергии электронов, вызванное «внешним» деформационным потенциалом $U(x)$. Все электронные состояния (6.75) с $\varepsilon > 0$ при $T = 0$ будут пустыми, а состояния с $\varepsilon < 0$ — занятыми. Поэтому энергия системы равна

$$E_{\text{эл}} = -2 \sum_k \sqrt{v_F^2 k^2 + |\Delta|^2} \qquad (6.77)$$

(множитель 2 учитывает спиновое вырождение). Эта сумма расходится степенным образом при $k \to \pm\infty$, благодаря электронным состояниям, расположенным глубоко под уровнем Ферми. Однако поскольку энергия этих состояний почти не меняется при включении потенциала $U(x)$, они дают относительно небольшой вклад в *изменение* энергии

$$\delta E_{\text{эл}} = E_{\text{эл}}(\Delta) - E_{\text{эл}}(\Delta = 0) = -2 \sum_k \left(\sqrt{v_F^2 k^2 + |\Delta|^2} - v_F |k| \right). \qquad (6.78)$$

Это выражение все еще расходится при больших k, но уже лишь логарифмически. Обрезая эту расходимость при $k \approx \pm p_0$, получаем

$$\delta E_{\text{эл}} = -\frac{L|\Delta|^2}{\pi v_F}\left(\ln\frac{2\varepsilon_*}{|\Delta|} - \frac{1}{2}\right), \tag{6.79}$$

где $\varepsilon_* = v_F p_0$, а L — размер системы. Наше вычисиление $\delta E_{\text{эл}}$ корректно, поскольку $|\Delta| \ll \varepsilon_F$.

Чтобы определить оптимальную величину энергетической щели Δ, найдем изменение энергии решетки при возникновении модуляции:

$$E_{\text{реш}} = \frac{\rho c^2}{2}\int\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 dx = \rho c^2 p_0^2 u_0^2 L = \frac{L|\Delta|^2}{g^2}\,. \tag{6.80}$$

Видно, что при самых малых $|\Delta|$ отрицательное изменение энергии электронов (6.79) преобладает. Величина Δ определяется из условия минимизации полной энергии $\delta E_{\text{эл}} + E_{\text{реш}}$ как функции Δ, что дает

$$\Delta_0 = \varepsilon_* \exp\left(-\pi\, v_F/g^2\right)\,. \tag{6.81}$$

Величина Δ_0 определяет характерный масштаб энергий, при которых имеет место эффект Пайерлса. Как видно из (6.75), именно при энергиях $\varepsilon \approx \Delta_0$ происходят изменения в спектре электронов. Величина Δ_0 также определяет температуру $T_c \approx \Delta_0$, при которой происходит фазовый переход в пайерлсовское состояние (см. задачу 39). В реальных материалах температура T_c может составлять от нескольких единиц до сотен градусов.

Рассмотрим теперь функции Грина электронов и фононов. Благодаря наличию правых и левых состояний, для описания электронов, рассеивающихся на модуляции с $k = 2p_0$, необходимо использовать четыре функции:

$$G_{11}(x,x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_1(x)\psi_1^+(x')\rangle\,; \quad G_{22}(x,x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_2(x)\psi_2^+(x')\rangle\,;$$
$$G_{12}(x,x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_1(x)\psi_2^+(x')\rangle\,; \quad G_{21}(x,x') = -i\,\langle \mathrm{T}\,\psi_2(x)\psi_1^+(x')\rangle\,.$$

Функции $G_{ij}(x,x')$ можно вычислить, обратив матрицу $\varepsilon - \widehat{H}$:

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}_{\varepsilon,k} = \left(\varepsilon - \widehat{H}\right)^{-1} = \frac{1}{\varepsilon^2 - v_F^2 k^2 - |\Delta|^2 + i0}\begin{pmatrix} \varepsilon + v_F k & \Delta \\ \Delta^+ & \varepsilon - v_F k \end{pmatrix}. \tag{6.82}$$

Полюсы электронных функций Грина (6.82) дают закон дисперсии квазичастиц $\varepsilon(k) = \pm\left(k^2 v_F^2 + \Delta^2\right)^{1/2}$, в точности совпадающий с (6.75). Наличие щели в спектре подтверждает наш вывод о диэлектрическом характере основного сотояния.

Перед тем, как исследовать функцию Грина фононов, отметим некоторые качественные черты пайерлсовского состояния. При возникновении волны зарядовой плотности в системе спонтанно нарушается трансляционная симметрия движения электронов относительно решетки (возникающая модуляция решетки понижает симметрию основного состояния). При этом, однако, исходный микроскопический гамильтониан своей симметрии не теряет. Поэтому в системе должна появиться мягкая ветвь спектра элементарных возбуждений подобная акустическим фононам[4], частота которой обращается в нуль при $k = 0$.

В данном мягкая мода возникает благодаря тому, что энергия системы никак не зависит от фазы волны зарядовой плотности φ, если последняя постоянна. Если же φ медленно изменяется в пространстве, то это эквивалентно тому, что волновой вектор $k(x)$ отклоняется от $2p_0$ на $\partial\varphi/\partial x$. Модуляция с волновым вектором, отклоняющимся от оптимального значения $k = 2p_0$, приводит к некоторому увеличению энергии системы. Из этих рассуждений видно, что только *изменение* фазы модуляции $\varphi(x,t)$ в пространстве (или во времени) может привести к состоянию с бо́льшей энергией. Таким образом, фаза $\varphi(x,t)$ и есть переменная, описывающая в данном случае мягкую моду, часто поэтому называемую «фазонной модой». Как мы увидим ниже, из-за взаимодействия с электронами фазонная мода приобретает скорость $v_F \gg c$. Кроме фазонной моды, в системе есть также другая мода, связанная с отклонением $|\Delta|$ от Δ_0 (так называемый «амплитудон»). Поскольку энергия системы явно зависит от $|\Delta|$, мода колебаний амплитуды Δ не является мягкой: спектр соответствующих возбуждений отделен от энергии основного состояния щелью конечной величины.

Имея в виду вышесказанное, рассмотрим функцию Грина фононов $D(\omega,k)$. Уравнение Дайсона в этом случае имеет вид

$$D^{-1}(\omega,k) = D_0^{-1}(\omega,k) - g^2\Pi(\omega,k)\,, \quad D_0(\omega,k) = \frac{\omega_0^2(k)}{\omega^2 - \omega_0^2(k)}\,, \tag{6.83}$$

где $\omega_0(k) = c|k|$. При интересующих нас $k \approx 2p_0$ поляризационный оператор $\Pi(\omega,k)$ имеет нетривиальную зависимость от $\delta k = k - 2p_0$. В этой области он выражается через матричные функции Грина (6.82) следующим образом:

$$\Pi(\omega,k) = -i \int\!\!\int \mathrm{Tr}\,(\sigma_x G(\varepsilon_+,q_+)\sigma_x G(\varepsilon_-,q_-))\,\frac{d\varepsilon\,dq}{(2\pi)^2}\,, \tag{6.84}$$

где $\varepsilon_\pm = \varepsilon \pm \frac{1}{2}\omega$, $q_\pm = q \pm \frac{1}{2}\delta k$, а матрица Паули σ_x и след $\mathrm{Tr}\ldots$ определены в двумерном пространстве правых и левых состояний электронов, в соответствии с (6.82). Используя выражения (6.82) для матричных функций Грина, получаем

$$\Pi(\omega,k) = -i \int\!\!\int \frac{(\varepsilon_+ - v_F q_+)(\varepsilon_- + v_F q_-) + \Delta^2}{(\varepsilon_+^2 - v_F^2 q_+^2 - \Delta^2 + i0)(\varepsilon_-^2 - v_F^2 q_-^2 - \Delta^2 + i0)}\frac{d\varepsilon\,dq}{(2\pi)^2}\,, \tag{6.85}$$

Рассмотрим сначала случай $\omega = 0$, $\delta k = 0$ (т. е. $k = 2p_0$). Выражение (6.85) при этом дает

$$\Pi_0 \equiv \Pi(\omega = 0, k = 2p_0) = -\frac{i}{v_F}\int\!\!\int \frac{\varepsilon^2 - \tilde q^2 + \Delta^2}{(\varepsilon^2 - \tilde q^2 - \Delta^2 + i0)^2}\frac{d\varepsilon\,d\tilde q}{(2\pi)^2}\,, \tag{6.86}$$

[4] Читатель, знакомый с теоремой Голдстоуна, знает, что в этом проявляется общий принцип, требующий появления мягкой *голдстоуновской* моды при нарушении непрерывной симметрии в основном состоянии системы.

где $\tilde{q} = v_F q$. Вычислить интеграл в (6.86) можно следующим образом. Перейдем от вещественной частоты к мнимой по формуле $\varepsilon \longrightarrow i\varepsilon$. При таком преобразовании, как нетрудно видеть, направления обхода полюсов в выражении (6.86) остаются прежними. В результате получаем интеграл от функции, обладающей круговой симметрией:

$$\Pi_0 = \frac{1}{v_F}\int\!\!\int \frac{-\varepsilon^2 - \tilde{q}^2 + \Delta^2}{(\varepsilon^2 + \tilde{q}^2 + \Delta^2 + i0)^2}\frac{d\varepsilon\, d\tilde{q}}{(2\pi)^2} = \frac{1}{2\pi v_F}\int\limits_0^{\varepsilon_0} \frac{-r^2 + \Delta^2}{(r^2 + \Delta^2)^2} r\,dr = -\frac{1}{2\pi v_F}\ln\frac{\varepsilon_0}{e\Delta}\,, \tag{6.87}$$

где $e = 2,71828\ldots$, $r = (\varepsilon^2 + \tilde{q}^2)^{1/2}$, а значение энергии ε_0, на которой обрезан логарифмически расходящийся интеграл, выбрано порядка E_F.

Частота фононов с $k = 2p_0$, согласно рассуждениям о мягкой моде, должна быть равна нулю. Нетрудно видеть, что именно так и получается, если записать закон дисперсии $D^{-1}(\omega, k)_{k=2p_0} = 0$ с помощью уравнения Дайсона (6.83):

$$\left(\frac{\omega^2}{\omega_0^2(k)} - 1 - g^2\Pi(\omega, k)\right)_{k=2p_0} = 0\,. \tag{6.88}$$

Условие того, что данное уравнение на ω имеет решение $\omega = 0$, есть $1 + g^2\Pi_0 = 0$, что, согласно результату (6.87), эквивалентно соотношению (6.81) теории среднего поля, определяющему величину щели Δ.

С помощью изложенного метода можно найти поляризационный оператор $\Pi(\omega, k)$ при произвольных ω и k. Для этого перейдем к мнимым частотам $\varepsilon \longrightarrow i\varepsilon$, $\omega \longrightarrow i\omega$ непосредственно в выражении (6.85). При этом получаем

$$\Pi(w, w^*) = \frac{1}{2iv_F}\int\!\!\int \frac{-z_+^* z_- + \Delta^2}{(z_+^* z_+ + \Delta^2)(z_-^* z_- + \Delta^2)}\frac{dz^* dz}{(2\pi)^2}\,, \quad z_\pm = z \pm w/2\,, \tag{6.89}$$

где $z = v_F q + i\varepsilon$, $w = v_F\delta k + i\omega$. В силу круговой симметрии интегрируемой функции, выражение (6.89) зависит только от абсолютной величины комплексного w, причем $\Pi(w = 0) = \Pi_0$. При малых w выражение (6.89) принимает вид

$$\Pi(w, w^*) = \Pi_0 + \alpha\frac{g^2}{v_F}\frac{w^* w}{\Delta^2}\,, \qquad |w| \ll \Delta\,, \tag{6.90}$$

где $\alpha > 0$ — константа порядка единицы. Интеграл в (6.89) нетрудно вычислить точно, если сначала проинтегрировать по углу $\arg(z)$, а затем — по $|z|$. Однако для анализа закона дисперсии при $k \approx 2p_0$ нам будет вполне достаточно разложения (6.90).

Закон дисперсии $D^{-1}(\omega, k) = 0$, с учетом уравнения Дайсона (6.83), в котором мы используем поляризационный оператор в форме (6.90), дает

$$\frac{\omega^2}{\omega_0^2(k)_{k=2p_0}} - \alpha\frac{g^2}{v_F}\frac{w^* w}{\Delta^2} = 0 \tag{6.91}$$

(мы учли, что $1+g^2\Pi_0 = 0$). Переходя в выражении (6.91) от мнимой частоты обратно к вещественной, $\omega \longrightarrow \omega/i$, получаем линейный закон дисперсии вблизи $k \approx 2p_0$:

$$\left(\frac{\Delta^2}{\omega_0^2(k)_{k=2p_0}} + \alpha\frac{g^2}{v_F}\right)\omega^2 = \alpha\frac{g^2}{v_F}v_F^2\delta k^2\,. \qquad (6.92)$$

При малой константе электрон-фононного взаимодействия g величина Δ экспоненциально мала, и поэтому фазовая скорость $v_* = d\omega/dk$ близка к v_F. Качественный вид закона дисперсии фононов, получающегося в изложенной теории среднего поля, изображен на рис. 6.6. Исходный линейный фононный спектр и линеаризованный закон дисперсии (6.91) в окрестности $k = 2p_0$ показаны штриховой линией.

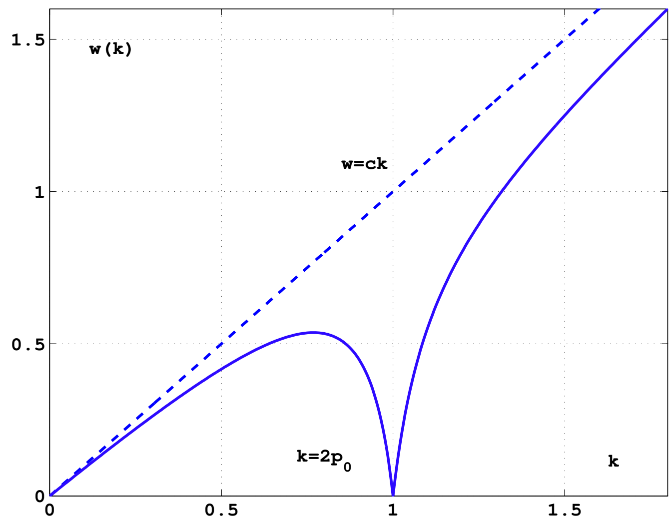


Рис. 6.6

Развитый выше аппарат во многом аналогичен теории сверхпроводимости (см. п. 10.2.2). Основное формальное отличие состоит в том, что в теории сверхпроводимости рассматриваются процессы рассеяния электронов с противоположными импульсами, а в данной задаче — процессы переброса электронов с одной стороны ферми-поверхности на другую (или, что то же самое, рассеяние электронов и дырок, двигающихся в противоположные стороны). Поэтому, как иногда говорят, в пайерлсовском диэлектрике имеет место спаривание электронов и дырок с противоположными импульсами.

Важное отличие от сверхпроводимости заключается однако в том, насколько теория среднего поля, пренебрегающая флуктуациями Δ, соответствует реальному положению вещей. Оказывается, что в сверхпроводниках флуктуациями можно пренебречь из-за малости температуры фазового перехода по сравнению с E_F (эта малость связана с тем, что температура сверхпроводящего перехода пропорциональна ω_D). В случае же с эффектом Пайерлса все не столь просто. Во-первых, температура перехода Пайерлса, как правило, выше, чем в сверхпроводниках, и поэтому флуктуации сильнее. Во-вторых, дополнительное усиление флуктуаций происходит из-за квазиодномерности. Конечно, реальные кристаллы все-таки трехмерны, и поэтому флуктуации не разрушают дальний порядок полностью, как это должно было бы случиться в чисто одномерном случае. Соответствующие эффекты трехмерности обычно малы, однако совсем пренебречь ими нельзя — они отвечают за поддержание дальнего порядка. Вследствие всего этого интервал температур вблизи $T = T_c$, в котором эффекты флуктуаций существенны, обычно оказывается довольно большим.

Отметим также, что одномерность играет в эффекте Пайерлса существенную роль. Можно проверить, что в размерностях больше единицы сингулярность поляризационного оператора при $k = 2p_0$ (так называемая коновская особенность) оказывается более слабой и не приводит к неустойчивости.

Несмотря на одномерность, эффект Пайерлса — часто встречающееся явление. Существуют кристаллы, в которых молекулы упорядочены в одномерные цепочки, вдоль которых распространяются электроны. В таких квазиодномерных сруктурах эффект Пайерлса приводит к фазовому переходу, при котором изменяется период решетки. Физика возникающих в таких системах состояний весьма разнообразна и интересна, поскольку помимо электрон-фононного взаимодействия часто оказывается существенным также и электрон-электроннное взаимодействие. В результате в таких системах могут возникать не только *волны зарядовой плотности*, рассмотренные выше, но и *волны спиновой плотности*, а также сверхпроводимость. Кроме того, иногда эффект Пайерлса может проявляться в «недоразвитом» виде и в трехмерных кристаллах (например, в висмуте, ферми-поверхность которого имеет плоские области, и выглядит скорее как гладко обструганный брусок, а не как сфера) [5].

[5]Подробнее с физикой волн зарядовой плотности можно ознакомиться по обзорам: Л. П. Булаевский, УФН, т. 115, с. 261 (1975); G. Grüner, Rev. Mod. Phys., v. 60 (4), p. 1129–1181 (1988); и книге: Charge density waves in solids, eds. L. P. Gorkov, G. Grüner (North Holland, 1989); см. также оригинальные работы: P. A. Lee, T. M. Rice, P. W. Anderson, Solid State Comm., v. 14, p. 703 (1974); С. А. Бразовский, И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ, т. 71, с. 2338 (1976).

Глава 7.

Диаграммная техника при конечных температурах

7.1. Мацубаровское время

Рассмотрим теперь диаграммную технику для систем при конечной температуре. Обобщение нуль-температурной техники на конечные температуры оказывается удивительно простым и красивым. Оно называется *диаграммной техникой Мацубары.*

Основная задача, решаемая в статистической физике равновесных систем, состоит в усреднении различных величин по распределению Гиббса. При этом рассматриваются средние вида

$$\left\langle \widehat{A} \ldots \widehat{B} \right\rangle_{\text{т}} = \sum_n w_n \left\langle n \middle| \widehat{A} \ldots \widehat{B} \middle| n \right\rangle, \tag{7.1}$$

где индекс «т» указывает на то, что среднее берется по распределению вероятностей различных состояний при конечной температуре T:

$$w_n = e^{-\beta E_n}/Z\,, \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}\ . \tag{7.2}$$

Здесь $|n\rangle$ — собственное состояние системы с энергией E_n, w_n — вероятность пребывания в этом состоянии, $\beta = 1/T$ — обратная температура, а Z — статистическая сумма. Выражение (7.1) можно записать так:

$$\left\langle \widehat{A} \ldots \widehat{B} \right\rangle_{\text{т}} = \frac{\operatorname{Tr}\left(\widehat{A} \ldots \widehat{B}\, e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}}\right)}{\operatorname{Tr} e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}}}\,. \tag{7.3}$$

Теория возмущений, позволяющая находить подобные средние, строится следующим образом. Представим гамильтониан в виде $\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$, где $\widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ — возмущение. В основе мацубаровской техники лежит аналогия между операторной экспонентой гамильтониана

$$\widehat{\mathcal{U}}_\beta = \exp\left(-\beta\left(\widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\text{int}}\right)\right) \tag{7.4}$$

и квантовомеханическим оператором эволюции

$$\widehat{U}(t) = \exp\left(-it\left(\widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}\right)\right) . \tag{7.5}$$

Переход от $\widehat{U}(t)$ к $\widehat{\mathcal{U}}_\beta$ осуществляется простой заменой: $t \to -i\beta$.

Оказывается, что такая аналогия имеет далеко идущие последствия. А именно, можно рассмотреть эволюцию системы во мнимом времени $t = -i\tau$ (τ называют иногда *мацубаровским временем*). Введем гейзенберговские операторы

$$\widehat{A}_M(\tau) = e^{\tau\widehat{\mathcal{H}}}\,\widehat{A}\,e^{-\tau\widehat{\mathcal{H}}} . \tag{7.6}$$

Эволюция этих операторов во мнимом времени дается уравнением

$$\frac{d\widehat{A}_M(\tau)}{d\tau} = \left[\widehat{\mathcal{H}},\,\widehat{A}_M(\tau)\right] . \tag{7.7}$$

Далее можно ввести мацубаровское представление взаимодействия:

$$\widehat{A}(\tau) = e^{\tau\widehat{\mathcal{H}}_0}\,\widehat{A}\,e^{-\tau\widehat{\mathcal{H}}_0} \tag{7.8}$$

и мацубаровскую S-матрицу:

$$\widehat{\mathcal{S}}(\tau) = e^{-\tau\widehat{\mathcal{H}}}\,e^{\tau\widehat{\mathcal{H}}_0} . \tag{7.9}$$

Нетрудно проверить, что эта S-матрица удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\widehat{\mathcal{S}}(\tau)}{d\tau} = -\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau)\widehat{\mathcal{S}}(\tau) , \tag{7.10}$$

где

$$\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau) = e^{\tau\widehat{\mathcal{H}}_0}\,\widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}\,e^{-\tau\widehat{\mathcal{H}}_0} \tag{7.11}$$

— оператор возмущения, записанный в представлении взаимодействия. Решение уравнения (7.10) имеет вид

$$\widehat{\mathcal{S}}(\tau) = \mathrm{T}_\tau \exp\left(-\int\limits_0^\tau \widehat{\mathcal{H}}_{\rm int}(\tau)\,d\tau\right) . \tag{7.12}$$

Символ T_τ обозначает хронологическое упорядочение операторов по мацубаровскому времени τ. Эта процедура аналогична обычному T-упорядочению (ср. с выражением (2.3)).

В мацубаровском представлении взаимодействия средние (7.3) принимают следующий вид:

$$\left\langle \widehat{A}\ldots\widehat{B}\right\rangle_{\rm т} = \frac{\mathrm{Tr}\left(\widehat{A}(\beta)\ldots\widehat{B}(\beta)\widehat{\mathcal{S}}(\beta)e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_0}\right)}{\mathrm{Tr}\left(\widehat{\mathcal{S}}(\beta)e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}_0}\right)} . \tag{7.13}$$

Для вывода этого соотношения надо воспользоваться тем, что операторы под знаком следа можно переставлять циклически. Таким образом,

$$\left\langle \widehat{A} \dots \widehat{B} \right\rangle_{\text{т}} = \frac{\left\langle \widehat{A}(\beta) \dots \widehat{B}(\beta)\, \widehat{\mathcal{S}}(\beta) \right\rangle_{\text{т},0}}{\left\langle \widehat{\mathcal{S}}(\beta) \right\rangle_{\text{т},0}}, \tag{7.14}$$

где усреднение $\langle \dots \rangle_{\text{т},0}$ обозначает $\mathrm{Tr}(\dots e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_0}) / \mathrm{Tr}(e^{-\beta \widehat{\mathcal{H}}_0})$ — среднее по распределению Гиббса с невозмущенным гамильтонианом $\widehat{\mathcal{H}}_0$.

Таким образом, возникающие формулы отличаются от случая $T = 0$ в основном заменой времени t на $-i\tau$. Другое отличие заключается в следующем. Усредняя по основному состоянию при $T = 0$, мы полагали, что возмущение при $t = -\infty$ отсутствует, а затем медленно включается. Поэтому во всех выражениях возникали величины $\widehat{S}(t, -\infty)$, $\widehat{S}(\infty, t)$ и $\widehat{S}(\infty, -\infty)$. При конечной же температуре во все формулы входит $\widehat{\mathcal{S}}(\tau)$ только при $0 < \tau < \beta$. Поэтому в мацубаровской технике нас интересует эволюция системы во мнимом времени в интервале от 0 до β.

Кроме того, в выражение (7.14) входит след, т. е. сумма вида $\sum_n \langle n| \dots |n\rangle$. Это означает, что на квантовомеханическую задачу накладывается дополнительное ограничение: через время β система обязана вернуться в исходное состояние. Поэтому оказывается удобным считать, что мацубаровское время — это переменная, принимающая значения на окружности, а β — длина этой окружности.

Таким образом, мы приходим к важному выводу: вычисление средних по распределению Гиббса сводится к квантовомеханической задаче во мнимом времени $0 < \tau < \beta$ с периодическими по времени граничными условиями.

Теперь можно развить теорию возмущений для вычисления термодинамических величин. Для этого вводится так называемая мацубаровская функция Грина:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') = -\langle \mathrm{T}_\tau\, \psi(\mathbf{r}, \tau)\, \psi^+(\mathbf{r}'\, \tau') \rangle_{\text{т}}\,. \tag{7.15}$$

(Для ферми- и бозе-статистики знак один и тот же.)

Поскольку в нашей задаче всегда $0 < \tau < \beta$, то $-\beta < \tau - \tau' < \beta$. Поэтому функция Грина (7.15) определена на отрезке $[-\beta, \beta]$. Кроме того, можно показать (см. [1], § 11), что

$$G(\tau) = \pm G(\tau + \beta)\,, \tag{7.16}$$

верхний знак относится к бозевским частицам, а нижний — к фермиевским.

С помощью функции Грина можно вычислять τ-упорядоченные средние. Как и в диаграммной технике при $T = 0$, в мацубаровской технике верна теорема Вика, поэтому τ-упорядоченное произведение ψ-операторов всегда можно выразить через парные средние. Это, в свою очередь, означает, что можно построить диаграммную технику для вычисления таких средних. В координатном пространстве правила практически совпадают с правилами диаграммной техники при $T = 0$, за тем исключением, что область интегрирования по мацубаровскому времени τ есть отрезок $[0, \beta]$. Кроме того, коэффициент перед мацубаровской диаграммой есть $(-1)^{n+F}$ (n — порядок теории возмущений, F — число фермионных петель), а не $i^n(-1)^F$, как в обычной технике.

7.2. Дискретные частоты

Вычисления в мацубаровской технике почти всегда проще производить не во временном, а в частотном представлении. Опишем, как выглядит соответствующий формализм. Поскольку функции Грина определены на отрезке $[-\beta, \beta]$, их можно разложить в ряд Фурье:

$$G(\tau, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = T \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G(i\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \,, \tag{7.17}$$

где $\omega_n = \pi n/\beta$, а множитель T в (7.17) введен для удобства. Условие (анти)периодичности (7.16) означает, что $G(i\omega_n) \neq 0$ для $\omega_n = 2\pi nT$ в случае бозе-частиц, и $\omega_n = (2n+1)\pi T$ в случае фермионов. Поэтому в мацубаровской технике частота принимает *дискретные* значения — четные для бозонов и нечетные для фермионов. Роль дискретной частоты ω_n в мацубаровской технике — такая же, как у энергии в обычной технике. Поэтому основное отличие диаграммной техники в частотном представлении состоит в замене интегралов по энергиям в функциях Грина на суммы по дискретным частотам. При этом сумма частот в вершине обязательно равна нулю («закон сохранения энергии»).

Приведем выражения для электронной и фононной функций Грина в импульсном представлении:

$$G(i\varepsilon_n,\, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi(\mathbf{p})} \,, \qquad \varepsilon_n = (2n+1)\pi T \;; \tag{7.18}$$

$$D(i\omega_n,\, \mathbf{k}) = -\frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega_n^2 + \omega_0^2(\mathbf{k})} \,, \qquad \omega_n = 2\pi nT \,. \tag{7.19}$$

Заметим, что эти выражения можно получить из причинных функций Грина заменой $\varepsilon,\ \omega \ \to\ i\varepsilon_n,\ i\omega_n$. Приведем также полную сводку правил диаграммной техники в импульсном представлении для случая двухчастичного взаимодействия (ср. гл. 4).

1) На каждой диаграмме нужно расставить импульсы $\mathbf{p}$ и мацубаровские частоты ω_n так, чтобы в каждой вершине выполнялись законы сохранения энергии и импульса. При этом линии бозе-частиц должны переносить четные частоты ($\omega_n = 2\pi nT$), а линии ферми-частиц — нечетные ($\omega_n = (2n+1)\pi T$).

2) Полученное выражение интегрируется по всем внутренним импульсам и суммируется по всем внутренним частотам.

3) Наконец, ответ следует умножить на

$$(-1)^{n+F}\, \frac{T^n}{(2\pi)^{3n}} \,, \tag{7.20}$$

где n — порядок теории возмущений, а F — число фермионных петель.

Итак, рецепт учета конечной температуры выглядит заманчиво просто. Нужно заменить энергии на $i\varepsilon_n$, интегралы по энергиям $\int ...d\varepsilon/2\pi$ на $T\sum_{\varepsilon_n} ...$ и просуммировать по дискретным частотам ε_n. Хотя на первый взгляд кажется, что выражения, полученные в мацубаровской технике при $T > 0$, должны быть как-то тривиально связаны с нуль-температурными выражениями, в действительности это не совсем так (см. задачи 40, 41).

7.2.1. Метод аналитического продолжения.

Мацубаровская техника позволяет легко вычислять одновременные средние любых величин. На первый взгляд, при рассмотрении динамики в реальном времени мацубаровская техника бесполезна. Ведь разновременные средние, которые эта техника использует, имеют вид $\langle \widehat{A}(\tau)\, \widehat{B}(0)\rangle$, где τ — это мацубаровское время, а не настоящее. Однако оказывается, что при помощи специального приема, рассмотренного ниже, мацубаровская техника может быть использована для вычисления определенных *разновременных средних*.

Существуют весьма общие соотношения между мацубаровскими функциями, определенными во мнимом времени, и функциями Грина в реальном времени, такими как запаздывающие и опережающие гриновские функции. Эти соотношения следуют только из аналитических свойств функций Грина, и никак не используют конкретного вида этих функций в той или иной системе. Поэтому они имеют столь же общий характер, как, скажем, флуктуационно-диссипационная теорема или соотношения Крамерса–Кронига для восприимчивости.

Рассмотрим запаздывающую и опережающую функции Грина, определенные[1] при конечной температуре следующим образом:

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -i\int\limits_0^\infty e^{i\varepsilon t_{12}} \langle \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\, \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2) \pm \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2)\, \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\rangle_{\text{т}}\, dt_{12}\,, \quad (7.21)$$

$$G^A(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = i\int\limits_{-\infty}^0 e^{i\varepsilon t_{12}} \langle \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\, \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2) \pm \widehat{\psi}^+(\mathbf{r}_2, t_2)\, \widehat{\psi}(\mathbf{r}_1, t_1)\rangle_{\text{т}}\, dt_{12}\,, \quad (7.22)$$

где $t_{12} = t_1 - t_2$, причем знак «$+$» соответствует фермионам, а знак «$-$» — бозонам. Оказывается, что мацубаровская функция Грина $G_M(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, аналитически продолженная с дискретных значений частоты $\varepsilon_n > 0$ на верхней мнимой полуоси дает $G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, в то время как при продолжении с нижней полуоси, $\varepsilon_n < 0$, получается $G^A(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Принимая во внимание аналитичность $G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $G^A(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ соответственно в верхней и нижней полуплоскостях комплексного ε, соотношение между G^R, G^A и G_M можно записать так:

$$G_M(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} G^R(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) & \text{при } \varepsilon_n > 0\,; \\ G^A(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) & \text{при } \varepsilon_n < 0\,, \end{cases} \quad (7.23)$$

где мацубаровские частоты ε_n — четные для бозонов и нечетные для фермионов. Доказательство результата (7.23) приведено в задаче 40 а).

[1] см. [1] § 17, формулы (17.15) и (17.16).

Из соотношений (7.23) между запаздывающими, опережающими и мацубаровскими функциями следует весьма полезное интегральное представление:

$$G(i\varepsilon_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(\varepsilon, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\varepsilon - i\varepsilon_n} \, d\varepsilon \,, \tag{7.24}$$

где интеграл по $d\varepsilon$ берется по всей вещественной оси. Действительно, при $\varepsilon_n > 0$ это соотношение есть следствие аналитических свойств запаздывающей функции Грина в верхней полуплоскости. Чтобы получить $G(i\varepsilon_n)$ при $\varepsilon_n < 0$, следует заменить запаздывающую функцию Грина на опережающую функцию $G^A(\varepsilon)$ и изменить знак в (7.24). Но поскольку на вещественной оси $\operatorname{Im} G^R(\varepsilon) = -\operatorname{Im} G^A(\varepsilon)$, соотношение (7.24) оказывается справедливым и при $\varepsilon_n < 0$.

Важным применением соотношений (7.23) является задача об отыскании линейного отклика системы, возмущаемой внешним полем. Согласно формуле Кубо, функция отклика выражается через среднее от коммутатора двух операторов в разные моменты времени:

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int\limits_{0}^{\infty} e^{i\omega t} \, \left\langle \left[\widehat{A}(t), \, \widehat{B}(0) \right] \right\rangle_{\text{т}} \, dt \,. \tag{7.25}$$

Имеется очевидное сходство между выражением (7.25) и запаздывающей бозонной функцией Грина (7.21), означающее, что эти две функции имеют сходные аналитические свойства. Чтобы получить для функции отклика (7.25) соотношения подобные (7.23), вводится *мацубаровская восприимчивость*

$$\chi^{(M)}_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2\hbar} \int\limits_{-\beta}^{\beta} \left\langle \mathrm{T}_\tau \; \widehat{A}(\tau) \, \widehat{B}(0) \right\rangle_{\text{т}} e^{i\omega_n \tau} \, d\tau \,. \tag{7.26}$$

Имеет место [2] так называемая *теорема об аналитическом продолжении: мацубаровская восприимчивость $\chi^{(M)}_{AB}(i\omega_n)$, продолженная с дискретного множества точек на положительной мнимой полуоси $\omega = i\omega_n$ $(n > 0)$ на вещественную ось* $\operatorname{Im}\omega = 0$, *дает восприимчивость Кубо $\chi_{AB}(\omega)$.*

Эта теорема, доказательство которой приведено в задаче 37, позволяет находить восприимчивость (7.25) с помощью функции $\chi^{(M)}_{AB}(i\omega_n)$, которую, в свою очередь, можно вычислить с помощью мацубаровской диаграммной техники.

В отсутствие взаимодействия мацубаровская восприимчивость дается всего одной диаграммой — петлей с операторами $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ в вершинах. Мацубаровская восприимчивость имеет такие же аналитические свойства, как поляризационный оператор. Напомним (см. задачу 24), что аналитические свойства восприимчивости Кубо и поляризационного оператора в нуль-температурной технике оказываются различными. А в мацубаровской технике между восприимчивостью и поляризационным оператором имеется простая связь. Согласно приведенной выше теореме, для получения восприимчивости достаточно вычислить петлю с мацубаровскими функциями Грина, и затем определенным образом продолжить ее на вещественные частоты.

[2] см. [1], § 17; § 37, п. 2; [6], § 91

Отметим, что иногда и случай $T = 0$ бывает удобнее рассматривать в мацубаровской технике. Для этого нужно вернуться от суммирования к интегрированию, поскольку при $T = 0$ точки $i\omega_n$ сливаются в мнимую ось в плоскости комплексной переменной ω. При этом $T\sum_{\omega_n} \ldots$ переходит просто в $\int \ldots d\omega/2\pi$. При таком методе вычисления не возникает сложностей с обходом полюсов гриновских функций, поскольку направление обхода оказывается правильным автоматически.

Для иллюстрации использования мацубаровских функций при нулевой температуре, докажем теорему об аналитическом продолжении для невзаимодействующей системы. В этом случае восприимчивость дается формулой (5.4), полученной из (7.25) по теореме Вика. Рассмотрим выражение (5.4) и заменим $\omega \to i\omega$. Теперь запишем дробь в формуле (5.4) в виде интеграла по вспомогательной мнимой частоте:

$$\begin{aligned} \frac{n(E_m) - n(E_k)}{E_k - E_m - i\omega} &= -\frac{1}{2\pi}\int \frac{d\varepsilon}{(i\varepsilon + \omega - E_k)(i\varepsilon - E_m)} = \\ &= -\frac{1}{2\pi}\int G_k^M(i\varepsilon + i\omega) G_m^M(i\varepsilon)\, d\varepsilon\,, \end{aligned} \tag{7.27}$$

Подставляя это выражение в (5.4), получаем

$$\chi_{AB}(i\omega) \;=\; -\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{Tr}\left(\widehat{G}^M(i\varepsilon + i\omega)\widehat{B}\widehat{G}^M(i\varepsilon)\widehat{A}\right)\, d\varepsilon\,. \tag{7.28}$$

Возвращаясь к вещественной частоте, видим, что физическая восприимчивость (7.25) действительно получается из восприимчивости (7.28) на мнимой частоте аналитическим продолжением по ω с положительной мнимой полуоси на вещественную ось. Выражение (7.28) не зависит явно от выбора базиса. Поэтому оно оказывается весьма удобным в случаях, когда собственные функции неизвестны, как например в задаче о ферми-газе в случайном потенциале (см. гл. 9).

Подведем итог. Хотя мацубаровская техника и использует динамику во мнимом времени, иногда имеющую не вполне ясный физический смысл, она оказывается полезной при описании динамики в реальном времени как при конечной, так и при нулевой температуре. Переход от мнимого времени к физическому времени достигается аналитическим продолжением с мнимых дискретных частот на вещественные. Отметим еще раз, что мацубаровская техника позволяет изучать неравновесные явления лишь на уровне линейного отклика. Более сложные кинетические задачи, в которых внешнее поле может возбуждать систему так сильно, что она не успевает возвращаться в равновесное состояние, таким способом решать нельзя.

Существует несколько разновидностей диаграммной техники, имеющей дело со средними, взятыми не по распределению Гиббса, а по произвольному неравновесному распределению. Наиболее популярной из них является диаграммная техника Келдыша[3]. Эта техника использует запаздывающие и опережающие функции Грина, а также матрицу плотности, и описывает динамику с помощью квантового аналога кинетического уравнения. С помощью техники Келдыша можно

---

[3]Хорошее изложение техники Келдыша можно найти в обзоре: J. Rammer, H. Smith, *Rev. Mod. Phys.*, v. 58 (2), p. 323–359 (1986); см. также [8], § 92–95.

изучать любые отклики, линейные и нелинейные, как в равновесных системах, так и в системах выведенных из равновесия.

Однако, из-за своей большой общности техника Келдыша оказывается весьма громоздкой, и использовать ее в такой простой задаче, как вычисление линейного отклика в термодинамически равновесном состоянии системы, оказывается не очень удобным. Вместо этого обычно применяют описанный в этом разделе прием, основанный на аналитическом продолжении мацубаровских величин.

Отметим здесь же, что для невзаимодействующих систем имеется возможность избежать использования мацубаровских величин. В этом случае, как мы видели в п. 5.1.1, выражение (7.25) для восприимчивости Кубо может быть преобразовано к виду (5.10), содержащему запаздывающую и опережающую функции Грина. В отличие от мацубаровской восприимчивости, однако, результат (5.10) не имеет места для взаимодействующих систем. В известном смысле, техника Келдыша позволяет обобщить формулу (5.10) на случай произвольных неравновесных систем.

Литература: Доказательство правил мацубаровской диаграммной техники приведено в [1], гл. III и [6], гл. IV. Определение временны́х (запаздывающих и опережающих) функций Грина при конечных температурах можно найти в [6], § 36 и [1], § 17. Связь между мацубаровскими, запаздывающими и опережающими функциями Грина рассмотрена в [6], § 37 и [1], § 17. Использование гриновских функций для вычисления термодинамического потенциала обсуждается в [1], § 16, § 17, п. 5.

7.3. Задачи 34 – 42

Задача 34. (*Затухание осцилляций.*) При конечной температуре распределение ферми-частиц по энергиям размывается на величину порядка T, что соответствует неопределенности радиуса ферми-сферы $\delta p_0 \approx T/v_F$. Пространственные осцилляции с $k = 2p_0$, имеющие место для неоднородной ферми-системы в основном состоянии соответственно видоизменяются.

Рассмотрите осцилляции[4] **а)** Фриделя (см. задачу 8) и **б)** Рудермана-Киттеля (см. задачу 22), и получите для них выражения, верные при конечной температуре $T \ll E_F$. Покажите, что осцилляции сохраняются на расстояниях меньше *тепловой длины* $l_{\text{т}} = \hbar v_F/2\pi T$ и экспоненциально затухают при $r \gtrsim l_{\text{т}}$.

Задача 35. (*Термодинамический потенциал и функции Грина.*) Рассмотрим взаимодействующую ферми-систему, в которой существенными являются диаграммы типа «собственно-энергетическая часть», а более сложные диаграммы, такие например, как поправка к вершине взаимодействия, несущественны. (Подобная ситуация имеет место для электрон-фононного взаимодействия в металле.) Для нахождения термодинамического потенциала Ω в этом случае необходимо рассмотреть диаграммы, показанные на рис. 7.1. Сумма этого диаграммного ряда дает изменение термо-

[4]На больших расстояниях $r \gg p_0^{-1}$ удобно использовать функцию Грина в координатном представлении — см. задачу 22 и начало § 38 [1].

динамического потенциала $\Omega - \Omega_0$ в результате взаимодействия.

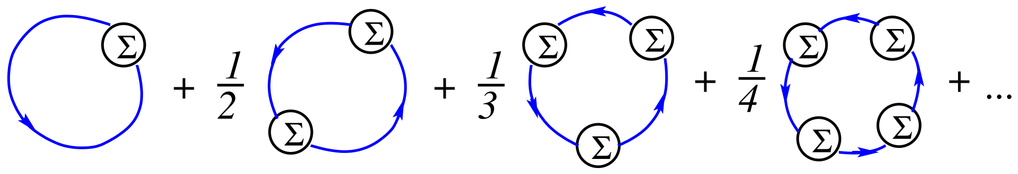


Рис. 7.1

а) Покажите, что термодинамический потенциал Ω выражается через функцию Грина

$$G_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_\alpha(\mathbf{p}) - \Sigma_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p})}\,, \tag{7.29}$$

где α — спиновый индекс, следующим образом:

$$\Omega = T \sum_{n,\mathbf{p},\alpha} e^{i\varepsilon_n \tau} \ln G_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p})\,, \quad \tau \to +0\,. \tag{7.30}$$

б) (*Энтропия и теплоемкость.*) Чтобы использовать формулу (7.30) для вычисления термодинамических функций, полезно привести ее к виду, содержащему вместо суммы по мацубаровским частотам интеграл по вещественным частотам. Воспользуйтесь для этого правилом

$$T \sum_n f(\varepsilon_n) = \frac{1}{4\pi i} \oint \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T} f(\varepsilon)\, d\varepsilon \qquad (\varepsilon_n = \pi T(2n+1)) \tag{7.31}$$

и перейдите к интегрированию по контуру, обходящему мнимую ось, на которой расположены полюсы функции $\operatorname{th}(\varepsilon/2T)$.

Найдите линейный по T член в теплоемкости[5] металла при низких температурах $T \ll \omega_D$ с учетом эффектов электрон-фононного взаимодействия. Как известно, в этом случае собственно-энергетическая часть $\Sigma(\varepsilon, \mathbf{p})$ не зависит от $\mathbf{p}$ и при малых энергиях $|\varepsilon| \ll \omega_D$ с хорошей точностью дается выражением $\Sigma(\varepsilon) = -b\varepsilon$ (см. задачу 29 и [1], § 21, п. 3).

Задача 36. (*Термодинамический потенциал фермионной цепочки.*) Рассмотрим фермионную цепочку (1.20)

$$\mathcal{H} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} J_1 a_i^+ a_{i+1} + J_1 a_{i+1}^+ a_i + J_2 a_i^+ a_{i+1}^+ + J_2 a_{i+1} a_i - B a_i^+ a_i\,, \tag{7.32}$$

обсуждавшуюся в задачах 2 и 20. Функция Грина для этой системы была найдена в задаче 20. Используя функцию Грина, найдите термодинамический потенциал Ω.

[5]Электрон-фононное взаимодействие дает также неаналитический по температуре вклад в теплоемкость металла: $\delta C \approx (T/\omega_D)^2 \ln(\omega_D/T)$ — см. [1], § 21, п. 4.

Задача 37. (*Мацубаровская восприимчивость.*)

а) Докажите теорему об аналитическом продолжении, сформулированную в п. 7.2.1. Запишите мацубаровскую восприимчивость и восприимчивость Кубо при конечной температуре в базисе точных собственных состояний невозмущенной системы и покажите, что второе выражение получается из первого аналитическим продолжением частоты ω с дискретных значений $2\pi inT$ на верхней мнимой полуоси ($n > 0$) на вещественную ось (см. [1], § 17, § 37, п. 2; [6], § 91).

б) Используя теорему об аналитическом продолжении, решите снова задачу 24 б, в которой требуется найти динамическую спиновую восприимчивость идеального ферми-газа.

в) (*«Парадокс».*) Рассмотрим свободный спин $s = 1/2$ при температуре T и найдем его восприимчивость χ по отношению к слабому внешнему полю двумя различными способами: по формуле Кубо и методом аналитического продолжения. Поскольку в отсутствие внешних полей гамильтониан $\mathcal{H}_0 = 0$, в данном случае оператор спина не зависит от времени. Поэтому коммутатор в формуле Кубо обращается в нуль, $[\hat{\mathbf{s}}_\alpha(t), \hat{\mathbf{s}}_\alpha(t')] = 0$ и, на первый взгляд, $\chi = 0$. Покажите, что мацубаровская восприимчивость в данном случае дает закон Кюри: $\chi = \beta\mu^2$, где μ — магнитный момент. Разрешите возникающий парадокс.

Задача 38. (*Флуктуации смещений решетки.*) Флуктуации смещений (6.1) атомов кристаллической решетки, возникающие вследствие нулевых колебаний и теплового движения, описываются корреляционной функцией $\langle \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r})\mathbf{u}_\beta(\mathbf{r}')\rangle_{\text{т}}$. Выразите коррелятор продольных компонент смещений

$$C_{\text{т}}(\mathbf{r}) = \langle u_{\parallel}(\mathbf{r})u_{\parallel}(0)\rangle_{\text{т}}\,, \quad u_{\parallel}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\mathbf{k}|}(\mathbf{k}\mathbf{u}_{\mathbf{k}})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\,, \tag{7.33}$$

через температурную функцию Грина фононов $D(i\omega_n, \mathbf{k})$ (см. (7.15), (7.19)), и получите для $C_{\text{т}}(\mathbf{r})$ общую формулу, справедливую при произвольном законе дисперсии фононов.

Найдите коррелятор смещений $C_{\text{т}}(\mathbf{r})$ для однородной изотропной упругой среды в размерностях $D = 1, 2, 3$, считая закон дисперсии фононов линейным. Рассмотрите $C_{\text{T}}(\mathbf{r})$ при $T{\neq}0$ и $T = 0$, выделяя $\Delta C_{\text{T}}(\mathbf{r}) = C_{\text{т}}(\mathbf{r}) - C_0(\mathbf{r})$. Найдите по порядку величины зависимость $C_0(\mathbf{r})$ и $\Delta C_{\text{т}}(\mathbf{r})$ от T и $\mathbf{r}$ при $T \to 0$, $r \to \infty$. Определите способ обрезания интегралов, расходящихся инфракрасно (на больших расстояниях) и ультрафиолетово (на малых расстояниях).

Задача 39. (*Переход Пайерлса: критическая температура и флуктуации.*) Вернемся к задаче 32, где изучалась пайерлсовская неустойчивость одномерного ферми–газа, возникающая вследствие электрон–фононного взаимодействия. Рассмотрим температурную функцию Грина фононов $D(i\omega_n, k)$ с учетом электрон-фононного взаимодействия.

а) Найдите поляризационный оператор $\Pi(i\omega_n, k)$ при $|k| \approx 2p_0$ и $T{\ll}E_F$. Рассмотрите корреляционную функцию фурье-компонент смещений:

$$C_{\text{т}}(k) = \langle u_k(t)\, u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}} \tag{7.34}$$

при совпадающих временах и k близких к $\pm 2p_0$. Найдите температуру T_c, при которой $C_{\text{т}}(k) \to \infty$.

б) Вблизи температуры перехода $T = T_c$ спектр фононов «смягчается». Из-за этого возрастают тепловые флуктуации гармоник поля смещений $u(r,t)$ с $|k| \approx 2p_0$. Интересующую нас часть поля с k вблизи $\pm 2p_0$ можно записать в виде:

$$u(r,t) = \mathrm{Re}\left(Q(r,t)\, e^{2ip_0 r}\right) \tag{7.35}$$

где $Q(r,t)$ — плавно зависящая от координат функция. Покажите, что при T немного выше T_c спектр флуктуаций $Q(r,t)$ имеет лоренцев вид

$$\langle Q_k(t) Q_{-k}(t)\rangle = \frac{A}{ak^2+\tau}\,, \quad \tau \equiv (T-T_c)/T_c \ll 1\,, \quad |k| \ll T_c/v_F\,. \tag{7.36}$$

Найдите пространственную зависимость коррелятора смещений $C_{\text{т}}(r)$, определенного выражением (7.33). Обратите внимание, что при выделении в выражении для $C_{\text{т}}(r)$ сильно флуктуирующей части, из всей суммы по $\omega_n = 2\pi n T$ остается только член с $n = 0$. Это соответствует переходу к классической термодинамике.

Выражение (7.36) называют *законом Орнштейна–Цернике.* Оно описывает корреляционную функцию параметра порядка вблизи T_c в теории среднего поля для любого фазового перехода.

Задача 40. (*Связь между запаздывающими, опережающими и мацубаровскими функциями.*)
а) Докажите соотношения (7.23), связывающие мацубаровскую функцию на верхней (нижней) мнимой полуоси с аналитическим продолжением запаздывающей (опережающей) функции Грина с вещественной оси в соответствующую полуплоскость комплексной частоты.

б) Существует весьма полезный метод вычисления мацубаровских диаграмм, опирающийся на аналитические свойства функций Грина[6]. С помощью этого метода можно «автоматизировать» процедуру аналитического продолжения, необходимую для перехода от мацубаровских к запаздывающим и опережающим функциям. Кроме того, он позволяет выполнить в явном виде суммирование по мацубаровским частотам в любой диаграмме.

В качестве примера рассмотрим собственно-энергетическую часть $\Sigma(i\varepsilon_n, \mathbf{p})$ мацубаровской функции Грина электрона, взаимодействующего с фононами:

$$\Sigma(i\varepsilon_n, \mathbf{p}) = -g^2 T \sum_{i\varepsilon'_m} \int G(i\varepsilon'_m, \mathbf{p}_1) D(i\varepsilon_n - i\varepsilon'_m, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3}\,. \tag{7.37}$$

Соответствующая диаграмма изображена на рис. 4.10.

Выполните суммирование в (7.37) в общем виде, пользуясь аналитическими свойствами гриновских функций (7.23), (7.24). Получите формулу[7]

$$\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{g^2}{2\pi^2} \int \frac{d^3\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(\mathrm{th}\,\frac{\varepsilon'}{2T} + \mathrm{cth}\,\frac{\omega}{2T}\right) \times$$

[6] см. работу: Г. М. Элиашберг// ЖЭТФ.1960.т.39.с.1437, а также [1], § 21, п. 3; [6], § 96.

$$\times \frac{\operatorname{Im} G^R(\varepsilon', \mathbf{p}_1) \operatorname{Im} D^R(\omega, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{\varepsilon - \varepsilon' - \omega + i0} d\varepsilon' \,, \tag{7.38}$$

где интеграл берется по вещественным ε' и ω. Выражение (7.38) по своей структуре напоминает полученные в задаче 24 б формулы (5.57), (5.53), дающие восприимчивость при $T = 0$ и явно учитывающие аналитические свойства, следующие из принципа причинности.

Задача 41. (*Динамика вблизи перехода.*) Рассмотрим динамику электронов и фононов в одномерной системе при температуре вблизи перехода Пайерлса. Будем считать, что T несколько выше T_c. При этом, как мы выяснили в задаче 39, в системе имеются сильные флуктуации поля смещений решетки с k вблизи $\pm 2p_0$. Естественно ожидать, что динамика фононов с такими k является *медленной*.

а) Найдите запаздывающую функцию Грина фононов, используя мацубаровскую функцию фононов, полученную в задаче 39.

б) Найдите запаздывающую функцию Грина электронов, описывающую эффект рассеяния электронов на флуктуациях поля смещений вблизи T_c. Считайте рассеяние слабым и найдите собственно-энергетическую часть (7.38) во втором порядке по взаимодействию с «мягкими» фононами, функция Грина которых получена в части а).

Задача 42*. (*Взаимодействие ван-дер-Ваальса при* $T > 0$.) Рассмотрим два атома на расстоянии r друг от друга. При r много большем размера атомов $a_B = \hbar^2/me^2$ обменное взаимодействие, обязанное своим существованием туннелированию электронов, становится экспоненциально малым, и основным является *ван-дер-ваальсово взаимодействие*, возникающее благодаря флуктуациям электромагнитного поля. Потенциал этого взаимодействия, как при нулевой, так и при конечной тампературе, можно выразить через поляризуемости атомов.

Предположим, что область пространства, в которой находятся два атома, заполнена равновесным излучением с температурой T. На каждый из атомов со всех сторон падает свет и, рассеиваясь, оказывает давление. Для одного атома силы давления компенсируются, поскольку распределение излучения по углам изотропно. Если же имеется второй атом, то он экранирует часть излучения, падающего на первый атом, и появляется результирующая сила притяжения [8].

Выразите эту силу через поляризуемости атомов, считая их основные состояния изотропными, т. е. характеризующимися орбитальным угловым моментом $L = 0$. Используйте температурные гриновские функции фотонов $D_{\alpha\beta}(r_1, r_2, \tau_1 - \tau_2) = -\langle \mathrm{T}_\tau A_\alpha(r_1, \tau_1) A_\beta(r_2, \tau_2)\rangle_{\mathrm{T}}$ в кулоновской калибровке $A_0 = \Phi = 0$. В мацубаровском

---

[7] Мнимая часть функций Грина в (7.38) определена стандартным образом. В частности, для свободных частиц $\operatorname{Im}(\varepsilon - \xi + i0)^{-1} = -\pi\delta(\varepsilon - \xi)$.

[8] Если бы вместо атомов в пространстве, заполненном излучением, находились два одинаковых макроскопических поглощающих шара, то сила притяжения между ними спадала бы как $1/r^2$. Это справедливо при диаметре шаров $(r\lambda_{\mathrm{T}})^{1/2} \ll a \ll r$, где $\lambda_{\mathrm{T}} = 2\pi\hbar c/T$. В XVIII в. подобный механизм предлагался для объяснения закона тяготения.

фурье-представлении они имеют вид

$$D_{\alpha\beta}(i\omega_n, k) \;=\; -\frac{4\pi\hbar}{\omega_n^2/c^2 + k^2}\left(\delta_{\alpha\beta} + \frac{c^2 k_\alpha k_\beta}{\omega_n^2}\right) \tag{7.39}$$

(см. [1], § 28, формула (28.27 б); [6], § 79)

Ван-дер-ваальсово взаимодействие есть частный случай так называемой *корреляционной* энергии системы, состоящей из двух или большего числа взаимодействующих подсистем. Корреляционная энергия, найденная в низшем неисчезающем порядке по взаимодействию, всегда отрицательна, поскольку она представляет собой поправку к энергии основного состояния второго порядка по взаимодействию. Другой пример системы, в которой корреляционная энергия играет важную роль — электронная ферми-жидкость (см. задачи 48 б) и 49).

7.4. Решения задач 34 – 42

34 а. Будем решать эту задачу по аналогии с задачей 8. Рассмотрим мацубаровскую функцию Грина

$$G(\tau, x, x') = -\langle \mathrm{T}_\tau\, \psi(x, 0)\, \psi^+(x', \tau)\rangle_{\mathrm{T}} \tag{7.40}$$

и запишем плотность частиц $n(x)$ в виде

$$n(x) = 2\lim_{\tau\to -0} G(\tau, x, x) \tag{7.41}$$

(множитель 2 учитывает спин). Как и в задаче 8, функция Грина при наличии стенки получается методом изображений:

$$G(\tau, x, x') = G_0(\tau, x, x') - G_0(\tau, x, -x')\,, \tag{7.42}$$

где $G_0(\tau, x, x')$ — гриновская функция ферми-газа на прямой $-\infty < x < \infty$. Отсюда получается такое выражение для плотности частиц:

$$n(x) = 2\Big(G_0(\tau = -0,\ x = 0) - G_0(\tau = -0,\ 2x)\Big)\,. \tag{7.43}$$

Чтобы найти $G_0(\tau, x)$, вспомним, что ее фурье-образ есть $G_0(i\omega_n,\, p) = 1/(i\omega_n - \xi_p)$. Поэтому

$$G_0(\tau, x) = T\sum_{\omega_n}\int \frac{e^{ipx - i\omega_n\tau}}{i\omega_n - \xi_p}\,\frac{dp}{2\pi}\,. \tag{7.44}$$

Перейдем в (7.44) к интегрированию по ξ, выделяя области импульсов $p \approx \pm p_0$:

$$G_0(\tau, x) = \frac{T}{2\pi v_F}\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}\left(e^{ip_0 x}\int \frac{e^{i\xi x/v_F}}{i\omega_n - \xi}d\xi \;+\; e^{-ip_0 x}\int \frac{e^{-i\xi x/v_F}}{i\omega_n - \xi}d\xi\right) \tag{7.45}$$

Рассмотрим следующее выражение:

$$I(\tau, x) = \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}\int \frac{e^{i\xi x/v_F}}{i\omega_n - \xi}d\xi\,. \tag{7.46}$$

Вычислим $I(\tau, x)$ при $x > 0$. Замыкая контур интегрирования по ξ в верхней полуплоскости, получаем

$$I(\tau, x) = -2\pi i \sum_{\omega_n > 0} e^{-\omega_n(x + i v_F \tau)/v_F} = \frac{-\pi i}{\operatorname{sh}\left(\pi T(\frac{x}{v_F} + i\tau)\right)}. \tag{7.47}$$

Нетрудно показать, что выражение (7.47) справедливо и при $x < 0$. В результате

$$G_0(\tau, x) = -i\frac{T}{2v_F}\left(\frac{e^{ip_0 x}}{\operatorname{sh}\left(\pi T(x/v_F + i\tau)\right)} - \frac{e^{-ip_0 x}}{\operatorname{sh}\left(\pi T(x/v_F - i\tau)\right)}\right), \tag{7.48}$$

откуда

$$G_0(\tau \to -0,\ x) = \frac{T \sin p_0 x}{v_F\ \operatorname{sh}\left(\pi T x/v_F\right)}. \tag{7.49}$$

Теперь, пользуясь (7.43), можно найти плотность частиц:

$$n(x) = \frac{2T}{v_F}\left(\frac{v_F\, p_0}{\pi T} - \frac{\sin\left(2p_0 x\right)}{\operatorname{sh}\left(2\pi T x/v_F\right)}\right) = n_0\left(1 - \frac{\pi T\ \sin\left(2p_0 x\right)}{v_F p_0\ \operatorname{sh}\left(2\pi T x/v_F\right)}\right), \tag{7.50}$$

где $n_0 = 2p_0/\pi$ — плотность газа вдали от стенки. При $T \to 0$ это выражение, очевидно, воспроизводит ответ задачи 8. Заметим также, что при $x \gg v_F/2\pi T$ осцилляции экспоненциально затухают. Характерное число осцилляций $N \approx p_0 v_F/\pi T$ велико при температурах, много меньших энергии Ферми.

34 б. Эффект Рудермана–Киттеля рассмотрим по аналогии с задачей 23. В первую очередь нам понадобится мацубаровская функция Грина в координатно-энергетическом представлении. Вычислим ее, как в задаче 22:

$$\begin{aligned} G(i\omega_n,\, \mathbf{r}) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{pr}}}{i\omega_n - \xi_p} = \frac{\nu_0}{pr}\int \frac{\sin(p_0 + \xi/v_F)r}{i\omega_n - \xi}\, d\xi = \\ &= \frac{\nu_0}{2ipr}\int \frac{e^{i(p_0+\xi/v_F)r} - e^{-i(p_0+\xi/v_F)r}}{i\omega_n - \xi}\, d\xi = -\frac{m}{2\pi r} e^{ir(p_0 + i\omega_n/v_F)\operatorname{sign}\omega_n}. \end{aligned} \tag{7.51}$$

Точно так же, как и в задаче 23, выразим плотность спина через функцию Грина. Все выкладки отличаются лишь заменой $-i$ на -1 в определениях функций Грина и в операторе возмущения. Поэтому

$$\sigma^i(r) = 2JS^i\, T\sum_{\omega_n} G_0^2(i\omega_n, r), \tag{7.52}$$

что приводит к

$$\sigma_i(r) = 2JS_i T\left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2\left(\sum_{\omega_n>0} e^{2ip_0 r - 2\omega_n r/v_F} + \sum_{\omega_n<0} e^{-2ip_0 r + 2\omega_n r/v_F}\right). \tag{7.53}$$

Выполняя суммирование по ω_n, получаем

$$\sigma^i(r) = \ JS^i\ \frac{m^2 T}{2\pi^2 r^2}\ \frac{\cos(2p_0 r)}{\operatorname{sh}(2\pi T r/v_F)}. \tag{7.54}$$

При $T \to 0$ это выражение переходит в полученное ранее. Длина, на которой затухают осцилляции, оказывается равной $v_F/(2\pi T)$, как и для фриделевских осцилляций (7.50).

35 а. Как известно, суммирование ряда для термодинамического потенциала осложняется тем, что по сравнению с рядом для функции Грина каждая из диаграмм содержит дополнительный множитель $1/n$, где n — порядок диаграммы по взаимодействию. Канонический способ преодоления этой трудности — дифференцирование диаграмм по константе связи, устраняющее множители $1/n$. В случае же диаграмм, изображенных на рис. 7.1, в использовании подобного приема нет необходимости, поскольку имеющийся ряд легко суммируется. Действительно, n-й член ряда представляет собой замкнутую петлю из n функций $G_{0,\alpha}(i\varepsilon_n, \mathbf{p})$ и n функций $\Sigma_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{p})$. Его вклад в термодинамический потенциал есть

$$\delta\Omega_n = \frac{1}{n} T \sum_{m,\mathbf{p},\alpha} \left(G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m, \mathbf{p})\Sigma_\alpha(i\varepsilon_m, \mathbf{p})\right)^n . \tag{7.55}$$

Сумма этих вкладов есть не что иное как

$$\begin{aligned}\Omega - \Omega_0 &= -T \sum_{m,\mathbf{p},\alpha} \ln\left(1 - G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m, \mathbf{p})\Sigma_\alpha(i\varepsilon_m, \mathbf{p})\right) = \\ &= T \sum_{m,\mathbf{p},\alpha} \ln\left(\frac{G_\alpha(i\varepsilon_m, \mathbf{p})}{G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m, \mathbf{p})}\right) .\end{aligned} \tag{7.56}$$

С другой стороны, можно проверить, что для свободных фермионов

$$\Omega_0 = T \sum_{m,\mathbf{p},\alpha} e^{i\varepsilon_m \tau} \ln\left(G_{0,\alpha}(i\varepsilon_m, \mathbf{p})\right) , \quad \tau \to +0 . \tag{7.57}$$

Чтобы доказать соотношение (7.57), рассмотрим выражение

$$F(a) = -T \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\varepsilon_m \tau} \ln\left(i\varepsilon_m - a\right) \tag{7.58}$$

где $\varepsilon_m = \pi T(2m+1)$, $\tau \to +0$. Дифференцируя это выражение по a, получаем

$$F'(a) = -T \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\varepsilon_m \tau}}{a - i\varepsilon_m} = \frac{1}{e^{\beta a} + 1} . \tag{7.59}$$

В справедливости последнего равенства можно убедиться, заметив, что полюсы выражения $1/(e^{\beta a}+1)$ и вычеты в них совпадают с полюсами и вычетами выражения под знаком суммы в (7.59). Это условие определяет зависимость F' от a с точностью до неизвестной целой функции a. Чтобы найти эту целую функцию (и убедиться в том, что она равна нулю) можно рассмотреть выражение (7.59) при больших $\operatorname{Re} a$. В пределе $|\operatorname{Re} a| \gg T$ сумму в (7.59) можно заменить интегралом

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{e^{z\tau}}{z - a} dz = \begin{cases} 1 & \text{при } \operatorname{Re} a < 0, \\ 0 & \text{при } \operatorname{Re} a > 0. \end{cases} \tag{7.60}$$

Получающаяся зависимость от a совпадает с асимптотикой выражения $(e^{\beta a}+1)^{-1}$.

Зная F', нетрудно найти F прямым интегрированием:

$$F(\xi) = -\int_{\xi}^{\infty}(e^{\beta a}+1)^{-1}da = T\int_{e^{-\beta\xi}}^{0}(1+e^{-\beta a})^{-1}de^{-\beta a} = -T\ln(1+e^{-\beta\xi}) \qquad (7.61)$$

Данное выражение есть не что иное, как термодинамический потенциал одного фермиона с энергией ξ. Отсюда требуемое соотношение (7.57) получается суммированием по состояниям всех фермионов системы.

35 б. Рассмотрим общее выражение (7.30) для термодинамического потенциала и, не конкретизируя пока вид функции Грина, преобразуем это выражение к форме, удобной для вычисления термодинамических функций. Представим сумму по $\varepsilon_m = \pi T(2m+1)$ в виде контурного интеграла:

$$\Omega = \sum_{\mathbf{p},\alpha}\left(\int_{C_1}+\int_{C_2}\right)\operatorname{th}\frac{z}{2T}\,\ln G_\alpha(z,\mathbf{p})e^{z\tau}\,\frac{dz}{4\pi i}\,, \qquad (7.62)$$

где контуры C_1 и C_2 охватывают верхнюю и нижнюю мнимые полуоси $\operatorname{Im} z > 0$ и $\operatorname{Im} z < 0$, как показано на рис. 7.2.

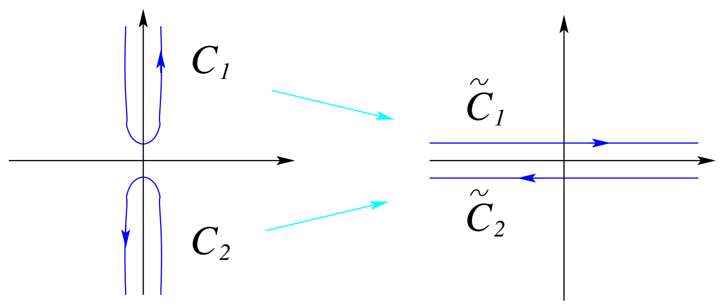


Рис. 7.2

Найдем энтропию $S = -\partial\Omega/\partial T$, дифференцируя интеграл (7.62) по параметру T:

$$S = \sum_{\mathbf{p},\alpha}\left(\int_{C_1}+\int_{C_2}\right)\frac{z}{2T^2\operatorname{ch}^2(z/2T)}\,\ln G_\alpha(z,\mathbf{p})e^{z\tau}\,\frac{dz}{4\pi i}\,, \qquad (7.63)$$

где $G_\alpha(z,\mathbf{p})$ есть аналитическое продолжение мацубаровской функции Грина с положительной и отрицательной мнимой полуоси соответственно в области $\operatorname{Im} z > 0$ и $\operatorname{Im} z < 0$.

Выражение (7.63) весьма удобно для вычислений, поскольку функция $1/\operatorname{ch}^2(z/2T)$ эспоненциально быстро убывает при удалении z от мнимой оси. Это обстоятельство позволяет развернуть контуры, направив их вдоль вещественной оси, как показано на рис. 7.2. В получившемся выражении можно пренебречь множителем $e^{z\tau}$, поскольку функция $1/\operatorname{ch}^2(z/2T)$ обеспечивает сходимость интеграла по z.

Заметим теперь, что аналитическое продолжение мацубаровской функции в области $\operatorname{Im} z > 0$ дает запаздывающую функцию $G^R(z, \mathbf{p})$, а в области $\operatorname{Im} z < 0$ — опережающую функцию $G^A(z, \mathbf{p})$ (см. задачу 40). Поэтому интеграл по контурам $\widetilde{C}_1$ и $\widetilde{C}_2$ можно представить в виде интеграла по вещественным z от выражения, содержащего разность $\ln G^R(z, \mathbf{p}) - \ln G^A(z, \mathbf{p})$. Это дает следующую полезную формулу:

$$S = \sum_{\mathbf{p},\alpha} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon}{2T^2 \operatorname{ch}^2(\varepsilon/2T)} \ln\left(\frac{G^R_\alpha(\varepsilon, \mathbf{p})}{G^A_\alpha(\varepsilon, \mathbf{p})}\right) \frac{d\varepsilon}{4\pi i}\,. \tag{7.64}$$

Отметим, что при вещественном ε величины $G^R_\alpha(\varepsilon, \mathbf{p})$ и $G^A_\alpha(\varepsilon, \mathbf{p})$ комплексно сопряжены, и значит выражение в скобках в (7.64) есть не что иное, как $2i \arg G^R_\alpha(\varepsilon, \mathbf{p})$. Поэтому выражение (7.64) можно переписать так:

$$S = \sum_{\mathbf{p},\alpha} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon}{2T^2 \operatorname{ch}^2(\varepsilon/2T)} \arg G^R_\alpha(\varepsilon, \mathbf{p}) \frac{d\varepsilon}{2\pi}\,. \tag{7.65}$$

Рассмотрим теперь функцию Грина электронов, в которую включена собственно-энергетическая часть, описывающая взаимодействие с фононами. Как было выяснено в задаче 29, в данном случае собственно-энергетическая часть практически не зависит от импульса, являясь функцией одной лишь энергии. Запаздывающая функция Грина в этом случае есть $G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = (\varepsilon - \Sigma(\varepsilon) - \xi(\mathbf{p}) + i0)^{-1}$. Считая для простоты $\Sigma(\varepsilon)$ вещественным, получаем

$$\arg G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = \begin{cases} -\pi & \text{при } \xi(\mathbf{p}) > \varepsilon - \Sigma(\varepsilon), \\ 0 & \text{при } \xi(\mathbf{p}) < \varepsilon - \Sigma(\varepsilon). \end{cases} \tag{7.66}$$

Просуммируем теперь (7.66) по ипульсам и проекциям спина. Поскольку нас интересует вклад от состояний с энергиями вблизи E_F, перейдем к интегрированию по ξ в конечных пределах $-\xi_0 < \xi < \xi_0$, где $\xi_0 \approx E_F$. Вычисляем интеграл:

$$\sum_{\mathbf{p},\alpha} \arg G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = -2\pi\nu_0 \int\limits_{-\xi_0}^{\xi_0} \theta\left(\xi - \varepsilon + \Sigma(\varepsilon)\right) d\xi = 2\pi\nu_0 \left(\varepsilon - \Sigma(\varepsilon) - \xi_0\right) \tag{7.67}$$

Множитель 2 возникает в результате суммирования по спинам. Подставим это выражение в (7.65) и заметим, что слагаемое $-2\pi\nu_0\xi_0$ приводит к интегралу по ε от нечетной функции, равному нулю. В результате получаем независящее от параметра обрезки ξ_0 окончательное выражение:

$$S = \nu_0 \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon\left(\varepsilon - \Sigma(\varepsilon)\right)}{2T^2 \operatorname{ch}^2(\varepsilon/2T)}\, d\varepsilon\,. \tag{7.68}$$

Подставляя в (7.68) собственно-энергетическую часть в виде $\Sigma(\varepsilon) = -b\varepsilon$, находим

$$S = (1+b)\nu_0 T \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2}{2\,\mathrm{ch}^2(x/2)} dx \;=\; 4\zeta(2)(1+b)\nu_0 T\,, \qquad (7.69)$$

где $\zeta(2) = \pi^2/6$. Отсюда теплоемкость $C = T\partial S/\partial T = (1+b)C_0(T)$, где $C_0 = (2\pi^2/3)\nu_0 T$ — теплоемкость идеального ферми-газа.

Приведенное вычисление нетрудно обобщить на случай ферми-системы с произвольным взаимодействием, не разрушающим ферми-жидкостную картину. В этом случае при малых ε и ξ собственно-энергетическая часть имеет вид $\Sigma(\varepsilon,\xi) = a\xi - b\varepsilon$. Как нетрудно видеть, при этом формула (7.65) приводит к линейной по T энтропии и равной ей теплоемкости $C(T) = [(1+b)/(1+a)]C_0(T)$. Отметим, что та же самая константа дает перенормировку эффективной массы: $m_*/m = (1+b)/(1+a)$.

36. Как и в задаче 20, будем использовать представление гамильтониана фермионной цепочки (1.20) в виде суммы $\mathcal{H}_0$ и $\mathcal{H}_{\rm int}$, где $\mathcal{H}_0$ содержит все члены, сохраняющие число фермионов, а $\mathcal{H}_{\rm int}$ — все члены, меняющие число ферминов на ± 2. Графическое представление функций Грина, получающихся в этом представлении, было найдено в задаче 20. Соответствующая последовательность диаграмм для термодинамического потенциала показана на рис. 7.3.

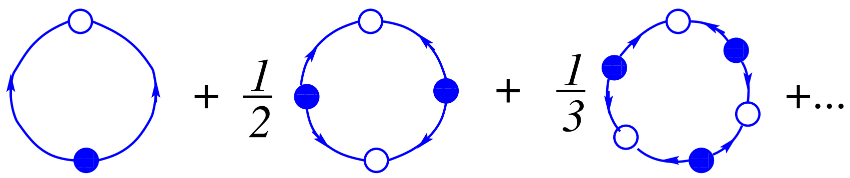


Рис. 7.3

Выражение, соответствующее n-му члену последовательности есть

$$\delta\Omega_n = \frac{1}{n} T \sum_{\varepsilon_m} \int\limits_0^{\pi} \Big((2iJ_2 \sin q)^2 G_0(i\varepsilon_m, p) G_0(-i\varepsilon_m, -p) \Big)^n \frac{dp}{2\pi}\,. \qquad (7.70)$$

Суммируя по $n = 1, 2, ...$, получаем изменение потенциала вследствие присутствия «взаимодействия» $\mathcal{H}_{\rm int}$:

$$\Omega - \Omega_0 = -T \sum_{\varepsilon_m} \int\limits_0^{\pi} \ln\Big(1 - (2iJ_2\sin q)^2 G_0(i\varepsilon_m, p) G_0(-i\varepsilon_m, -p)\Big) \frac{dp}{2\pi} =$$
$$= -T \sum_{\varepsilon_m} \int\limits_0^{\pi} \ln\left(\frac{\varepsilon_m^2 + 4(J_1\cos p - B)^2 + 4J_2^2 \sin^2 p}{\varepsilon_m^2 + 4(J_1 \cos p - B)^2} \right) \frac{dp}{2\pi} \qquad (7.71)$$

Пользуясь соотношениями (7.57) и (7.61), полученными в задаче 35, находим

$$\Omega - \Omega_0 = -2T \int_0^\pi \ln\left(\frac{\operatorname{ch}\beta\sqrt{(J_1\cos p - B)^2 + J_2^2\sin^2 p}}{\operatorname{ch}\beta(J_1\cos p - B)}\right)\frac{dp}{2\pi}. \tag{7.72}$$

Отделяя вклад Ω_0, получаем искомое выражение для термодинамического потенциала:

$$\Omega = -\frac{T}{\pi}\int_0^\pi \ln\left(2\operatorname{ch}\beta\sqrt{(J_1\cos p - B)^2 + J_2^2\sin^2 p}\right)dp. \tag{7.73}$$

37 а. Докажем, что аналитическое продолжение мацубаровской восприимчивости (7.26) дает восприимчивость Кубо (7.25). Запишем формальные выражения для обеих восприимчивостей базисе точных собственных состояний $|n\rangle$ рассматриваемой системы: $\widehat{\mathcal{H}}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Во избежание недоразумений заметим, что речь идет о многочастичных, а не об одночастичных состояниях.

Рассмотрим сначала восприимчивость Кубо:

$$\chi_{AB}(\omega) = i\int_0^\infty e^{i\omega t}\langle[\widehat{A}(t)\widehat{B}(0)]\rangle_{\text{т}} dt, \tag{7.74}$$

где $\langle\ldots\rangle_{\text{т}} = \operatorname{Tr}(e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}}\ldots)/\operatorname{Tr}e^{-\beta\widehat{\mathcal{H}}}$ — усреднение по распределению Гиббса, а $\widehat{X}(t) = e^{-it\widehat{\mathcal{H}}}\,\widehat{X}\,e^{it\widehat{\mathcal{H}}}$ — оператор в представлении Гейзенберга. Переходя к базису собственных состояний гамильтониана $\mathcal{H}$, получаем

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{Z}\int_0^\infty e^{i\omega t}\sum_{m,n} e^{-\beta E_n}\left(e^{-i\omega_{nm}t}\langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle - e^{i\omega_{nm}t}\langle n|\widehat{B}|m\rangle\langle m|\widehat{A}|n\rangle\right)dt, \tag{7.75}$$

где $\omega_{nm} = E_n - E_m$ — частота перехода, а $Z = \operatorname{Tr}\exp(-\beta\widehat{\mathcal{H}})$ — статистическая сумма. Меняя индексы m и n во втором члене суммы местами и интегрируя по t, находим

$$\chi_{AB}(\omega) = \sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega - \omega_{nm} + i0}\langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle. \tag{7.76}$$

Мнимая часть $i0$ возникает из-за множителя $\exp(-\delta t)$, который надо добавить в формально расходящийся интеграл по t для обеспечения его сходимости.

Теперь проделаем аналогичное вычисление для мацубаровской корреляционной функции

$$\chi^M_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_n\tau}\langle \mathrm{T}_\tau\,\widehat{A}^M(\tau)\,\widehat{B}^M(0)\rangle_{\text{т}}\,d\tau. \tag{7.77}$$

Здесь $\widehat{X}^M(\tau) = e^{-\tau\widehat{\mathcal{H}}}\,\widehat{X}\,e^{\tau\widehat{\mathcal{H}}}$ — мацубаровский оператор. В базисе собственных состояний получаем

$$\begin{aligned}\chi^M_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2Z}\int_0^\beta e^{i\omega_n\tau}\sum_{m,n} e^{-\beta E_n}e^{-\omega_{nm}\tau}\langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle\,d\tau\, + \\ + \frac{1}{2Z}\int_{-\beta}^0 e^{i\omega_n\tau}\sum_{m,n} e^{-\beta E_n}e^{\omega_{nm}\tau}\langle n|\widehat{B}|m\rangle\langle m|\widehat{A}|n\rangle\,d\tau.\end{aligned} \tag{7.78}$$

Снова переставляем индексы во второй сумме и вычисляем интеграл по τ (при этом полезно учесть, что $\omega_n \beta = 2\pi n$):

$$\chi^M_{AB}(i\omega_n) = \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{i\omega_n - \omega_{nm}} \langle n|\widehat{A}|m\rangle\langle m|\widehat{B}|n\rangle \,. \tag{7.79}$$

Доказательство интересующего нас утверждения получается из сравнения (7.76) и (7.79). Вспомним, что восприимчивость $\chi_{AB}(\omega)$ — аналитическая в верхней полуплоскости функция ω (это следует из того, что она есть фурье-преобразование функции, отличной от 0 лишь при $t > 0$). Значит, ее можно продолжить с вещественной оси на положительную мнимую полуось $\operatorname{Im}\omega > 0$. При этом, согласно (7.76) и (7.79), в точках $i\omega_n = 2\pi i n T$, $n > 0$, оба выражения совпадают.

Теперь предположим, что существует аналитическое продолжение $\chi^M_{AB}(i\omega_n)$ с верхней мнимой полуоси на всю верхнюю полуплоскость ω. Тогда это аналитическое продолжение должно совпасть с $\chi_{AB}(\omega)$, поскольку, согласно теореме теории функций комплексного переменного, две функции, аналитические в некоторой области и совпадающие на бесконечном множестве точек, имеющем предельную точку, совпадают во всей области.

37 б. Найдем динамическую спиновую восприимчивость ферми-газа при $T \ll E_F$. В задаче 24 б эта величина была найдена непосредственным усреднением операторов в формуле Кубо. Чтобы решить задачу с помощью мацубаровской техники мы вычислим мацубаровскую восприимчивость. Поскольку $\chi^M_{\alpha\beta}(i\omega_n, k)$ — хронологически упорядоченная величина (по отношению к мнимому времени), ее можно вычислять как петлю, составленную из мацубаровских функций Грина:

$$\chi^M_{\alpha\beta}(i\omega_n, k) = -2\mu_B^2 \delta_{\alpha\beta} T \sum_{\omega_m} \int G(i\omega_m, \mathbf{p})\, G(i\omega_m + i\omega_n, \mathbf{p} + \mathbf{k}) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \,. \tag{7.80}$$

Вычислим мацубаровскую сумму

$$T \sum_{\omega_m, \mathbf{p}} \frac{1}{(i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k})\ (i\omega_m - \xi_p)} \,, \tag{7.81}$$

разлагая произведение на простейшие дроби:

$$\sum_{\omega_m} \frac{1}{(i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k})\,(i\omega_m - \xi_p)} = \\ = \sum_{\omega_m} \frac{1}{i\omega_n - \xi_{p+k} + \xi_p} \left(\frac{1}{i\omega_m - \xi_p} - \frac{1}{i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k}} \right) .$$

Заметим, что поскольку $\omega_m = (2m+1)\pi T$ и $\omega_n = 2\pi n T$, во втором члене в скобках можно сделать сдвиг переменной суммирования $m \to m - n$, при котором из него исчезает ω_n. В каждом из слагаемых в скобках вещественная часть суммы сходится, а мнимая формально расходится. Однако она нечетна по m, и потому сокращается при приведении членов с противоположными m. Остается найти сумму вида

$$S(\xi) = T \sum_{\omega_m} \frac{\xi}{\omega_m^2 + \xi^2} \,, \tag{7.82}$$

что нетрудно сделать с помощью известного соотношения

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2 + a^2} = \frac{\pi}{2a} \operatorname{th} \frac{\pi a}{2} . \tag{7.83}$$

Поэтому интересующая нас сумма есть

$$S(\xi) = \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\beta\xi}{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{e^{\beta\xi}+1} \equiv \frac{1}{2} - n_F(\xi) , \tag{7.84}$$

где $n_F(\xi)$ — ферми-распределение. Возвращаясь к выражению (7.81), мы получаем весьма полезное тождество

$$T \sum_{\omega_m} \frac{1}{(i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k})\,(i\omega_m - \xi_p)} = \frac{n_F(\xi_{p+k}) - n_F(\xi_p)}{i\omega_n - \xi_{p+k} + \xi_p} , \tag{7.85}$$

которое часто используется при вычислении поляризационных операторов и восприимчивостей ферми-газа.

Используя соотношение (7.85), запишем мацубаровскую восприимчивость так:

$$\chi^M(i\omega,\, k) = 2\mu_B^2 \delta_{\alpha\beta} \int \frac{n_F(\xi_p) - n_F(\xi_{p+k})}{i\omega_n - \xi_{p+k} + \xi_p} \frac{d^3p}{(2\pi)^3} . \tag{7.86}$$

Поскольку нас интересуют достаточно малые $T \ll E_F$ и $|\mathbf{k}| \ll p_0$, перейдем к интегрированию по ξ. Так как $\int(n_F(\xi) - n_F(\xi + \mathbf{vk}))d\xi = \mathbf{vk}$ (независимо от величины T), получаем

$$\chi^M(i\omega_n,\, k) = 2\mu_B^2 \nu_0 \int \frac{\mathbf{kv}_F}{i\omega_n - \mathbf{kv}_F} \frac{do}{4\pi} . \tag{7.87}$$

Вычисляя интеграл по телесному углу так же, как в задаче 24 б, находим следующее выражение:

$$\chi^M_{\alpha\beta}(i\omega_n,\, k) = 2\mu_B^2 \nu_0 \delta_{\alpha\beta} \left(1 + \frac{i\omega_n}{2kv_F} \ln \frac{i\omega_n - kv_F}{i\omega_n + kv_F} \right) . \tag{7.88}$$

Для того чтобы аналитически продолжить (7.88) на вещественную ось, достаточно сделать замену $i\omega_n \to \omega + i0$. В результате получается

$$\chi(\omega,\, k) = 2\mu_B^2 \nu_0 \left(1 + \frac{\omega}{2kv_F} \ln \frac{\omega - kv_F + i0}{\omega + kv_F + i0} \right) . \tag{7.89}$$

Отделяя вещественную и мнимую части, находим

$$\operatorname{Re}\chi(\omega,\, k) \;=\; 2\mu_B^2 \nu_0 \left(1 + \frac{\omega}{2kv_F} \ln \left| \frac{\omega - kv_F}{\omega + kv_F} \right| \right) , \tag{7.90}$$

$$\operatorname{Im}\chi(\omega,\, k) \;=\; \pi\mu_B^2 \nu_0 \frac{\omega}{kv_F}\, \theta\left(kv_F - |\omega|\right) . \tag{7.91}$$

Заметим, что эти выражения, верные при произвольной температуре $0 \leqslant T \ll E_F$, в точности совпадают с вещественной и мнимой частями восприимчивости, найденной в задаче 24 б при $T = 0$.

37 в. Сначала рассмотрим мацубаровскую восприимчивость (7.26) спина во внешнем поле:

$$\chi(\omega_n) = \frac{\mu^2}{2} \int\limits_{-\beta}^{\beta} \langle \mathrm{T}_\tau \, \widehat{\mathbf{s}}_z(\tau) \widehat{\mathbf{s}}_z(0) \rangle e^{i\omega_n \tau} d\tau \,, \tag{7.92}$$

где μ — магнитный момент спина. Поскольку гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}_0}$ свободного спина в отсутствие внешнего поля равен нулю, динамика отсутствует. Поэтому $\widehat{\mathbf{s}}_z(\tau)\widehat{\mathbf{s}}_z(0) = \widehat{\mathbf{s}}_z^2(\tau) = 1$ и, следовательно,

$$\chi(\omega_n) = \left\{ \begin{array}{cc} \beta\mu^2 & \text{при } \omega_n = 0 \\ 0 & \text{при } \omega_n \neq 0 \end{array} \right\} = \frac{\beta\mu^2}{1 + \tau_0 \omega_n} \,, \quad \tau_0 T \gg 1 \,. \tag{7.93}$$

Мы записали результат в виде, позволяющем продолжить $\chi(\omega_n)$ с мнимых значений частоты на вещественные. Аналитическое продолжение дает $\chi(\omega) = \beta\mu^2/(1 - i\tau_0\omega)$. Переходя к статическому пределу $\omega \to 0$, убеждаемся в том, что мацубаровская восприимчивость дает закон Кюри.

Теперь найдем восприимчивость, используя динамику в реальном времени. Следуя логике, обычно приводящей к формуле Кубо, рассмотрим среднее значение намагниченности в какой-то момент времени:

$$\langle \mu \widehat{\mathbf{s}}_z(t) \rangle = \mu \, \mathrm{Tr} \left(e^{i\widehat{\mathcal{H}}(t-t_0)} \widehat{\mathbf{s}}_z(t_0) e^{-i\widehat{\mathcal{H}}(t-t_0)} \widehat{\rho} \right) \,, \quad \widehat{\mathcal{H}} = -\mu \widehat{\mathbf{s}}_z B_{\mathrm{ext}} \,, \tag{7.94}$$

где $\widehat{\rho} = Z^{-1} \exp\left(-\beta\widehat{\mathcal{H}}\right)$. Чтобы получить линейный отклик, надо разложить выражение (7.94) по B_{ext}, выделив линейный вклад. В стандартном выводе формулы Кубо по степеням B_{ext} разлагаются операторы эволюции $e^{\mp i\widehat{\mathcal{H}}(t-t_0)}$, что дает среднее от коммутатора операторов спина в различные моменты времени. При этом зависимостью матрицы плотности $\widehat{\rho}$ от B_{ext} пренебрегают на том основании, что в пределе $t - t_0 \to \infty$ зависимость от начальных условий в момент t_0 отсутствует. Однако это справедливо только в том случае, когда эволюция системы характеризуется «потерей памяти» о начальном состоянии, либо в силу эргодичности, либо из-за релаксационного характера динамики. В нашем же случае, поскольку $\widehat{\mathcal{H}_0} = 0$, эволюция невозмущенной системы вообще отсутствует, в результате чего система бесконечно долго помнит начальное состояние. Поэтому при нахождении линейного отклика следует разложить по B_{ext} не только операторы эволюции, но и матрицу плотности $\widehat{\rho}$ начального состояния. Как нетрудно видеть, это приводит к закону Кюри $\chi = \beta\mu^2$.

Таким образом, формула Кубо в своей обычной форме дает правильный ответ для восприимчивости только в том случае, когда при эволюции система «забывает» о начальном состоянии. Если же это не так, следует либо поправлять формулу Кубо, вводя в нее члены, зависящие от начального состояния, либо использовать мацубаровскую восприимчивость.

38. Гриновская функция фононов определяется через поле деформации $\widehat{\varphi}(\mathbf{r}, t)$ (см. (6.5)). Сравнивая выражение (6.5) с оператором (6.1) поля смещений решетки

$\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$, убеждаемся в том, что для дебаевских фононов с линейным законом дисперсии $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$ поле деформации $\widehat{\varphi}$ есть $c\sqrt{\rho}\,\mathrm{div}\,\widehat{\mathbf{u}}$. Следовательно, функция Грина фононов

$$D(\mathbf{r},\,\tau) = -\frac{c^2}{\rho}\langle \mathrm{T}_\tau \widehat{\varphi}(\mathbf{r},\tau)\,\widehat{\varphi}(0,0)\rangle_{\text{т}} = \\ = -T\sum_{\omega_n}\int \frac{\omega(\mathbf{k})^2}{\omega_n^2+\omega(\mathbf{k})^2}\,e^{-i\omega_n\tau+i\mathbf{kr}}\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D} \tag{7.95}$$

представляет собой коррелятор $\mathrm{div}\,\mathbf{u}$, умноженный на ρc^2. Поэтому коррелятор самих смещений получается [9] делением фононного пропагатора на $\rho\omega_{\mathbf{k}}^2$:

$$C_{\text{т}}(r) = \frac{T}{\rho}\sum_{\omega_n}\int \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega_n^2+\omega_{\mathbf{k}}^2}\,\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}\,. \tag{7.96}$$

Выполним суммирование по мацубаровским частотам с помощью формулы:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{n^2+a^2} = \frac{\pi}{a}\,\mathrm{cth}(\pi a)\,. \tag{7.97}$$

Получаем

$$C_{\text{т}}(r) = \frac{1}{2\rho}\int \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega(\mathbf{k})}\;\mathrm{cth}\,\frac{\omega(\mathbf{k})}{2T}\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}\,. \tag{7.98}$$

Удобно разделить вклады тепловых и квантовых флуктуаций в выражении (7.98), воспользовавшись представлением

$$\frac{1}{2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega}{2T} = \frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\beta\omega}-1} \equiv \frac{1}{2}+n_B(\omega)\,, \tag{7.99}$$

где $n_B(\omega)$ — функция распределения Бозе. Очевидно, что $1/2$ есть вклад нулевых колебаний, а $n_B(\omega)$ — тепловые флуктуации. Формулу (7.98) в таких обозначениях можно получить, не пользуясь мацубаровскими функциями Грина, а просто усредняя вторично квантованные операторы смещений (6.1) по гиббсовской матрице плотности.

Используя (7.99), представим (7.98) в виде $C_{\text{т}}(r) = C_0(r) + \Delta C_{\text{т}}(r)$, где

$$C_0(r) = \frac{1}{2\rho}\int \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega(\mathbf{k})}\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}\,, \tag{7.100}$$

$$\Delta C_{\text{т}}(r) = \frac{1}{\rho}\int \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega(\mathbf{k})}n_B(\omega(\mathbf{k}))\frac{d^Dk}{(2\pi)^D}\,. \tag{7.101}$$

[9] Строго говоря, это дает коррелятор продольных компонент смещений $\mathbf{u}_\parallel \parallel \mathbf{k}$. Однако, поскольку корреляторы всех компонент смещений одинаковы по порядку величины, мы ограничимся рассмотрением лишь продольных компонент.

Коррелятор $\Delta C_{\text{т}}(r)$ будет интересовать нас при $r \gg c/T$. В этом случае важен вклад лишь от достаточно малых $k \approx 1/r$, таких что $\omega(\mathbf{k}) \ll T$. Соответственно, разлагая бозевскую функцию распределения в (7.99) при малом ω, получаем

$$\Delta C_{\text{т}}(r) \approx \frac{T}{\rho} \int \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\omega^2(\mathbf{k})} \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \,. \tag{7.102}$$

Отметим, что (7.102) есть прямое следствие теоремы о равнораспределении из классической статистической физики.

После проведенной подготовки приступим к вычислению $C_0(r)$ и $\Delta C_{\text{т}}(r)$ в разных размерностях. Вначале вычислим $C_0(r)$.

А. $D = 3$:

$$C_0^{(3)}(r) = \frac{4\pi}{(2\pi)^3 \rho} \int\limits_0^\infty \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{k^2 dk}{ck} = \frac{1}{4\pi^2 \rho c r^2} \,. \tag{7.103}$$

Здесь использована формула

$$\int e^{i\mathbf{an}} do_{\mathbf{n}} = 4\pi (\sin a)/a \,. \tag{7.104}$$

Б. $D = 2$:

$$C_0^{(2)}(r) = \frac{1}{4\pi\rho c} \int\limits_0^\infty \int\limits_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{ikr\cos\theta} dk = \frac{1}{4\pi\rho c} \int\limits_0^\infty J_0(kr)\, dk = \frac{1}{4\pi\rho c r} \,. \tag{7.105}$$

В. $D = 1$:

$$C_0^{(1)}(r) = \frac{1}{4\pi\rho c} \int\limits_{-\infty}^\infty e^{ikr} \frac{dk}{|k|} = \frac{1}{2\pi\rho c} \int\limits_0^\infty \cos kr \,\frac{dk}{k} = \frac{1}{2\pi\rho c^2} \ln \frac{L}{r} \,. \tag{7.106}$$

При вычислении последнего интеграла, который формально расходится, необходимо обрезать логарифмическую расходимость. Как обычно, обрежем интеграл сверху на $k \approx 1/r$ (при бо́льших k осцилляции $\cos kr$ обеспечивают сходимость), а снизу — на $k \approx 1/L$, где L — размер системы (гармоник с меньшими k не существует).

Теперь рассмотрим тепловые флуктуации.

А. $D = 3$:

$$\Delta C_{\text{т}}^{(3)}(r) = \frac{T}{2\pi^2 \rho c R} \int\limits_0^\infty \sin(kr)\, \frac{dk}{k} = \frac{T}{4\pi\rho c r} \,. \tag{7.107}$$

Б. $D = 2$:

$$\Delta C_{\text{т}}^{(2)}(r) = \frac{T}{(2\pi)^2 \rho c^2} \int\limits_0^\infty \int\limits_0^{2\pi} e^{ikr\cos\theta} \,\frac{dk d\theta}{k} \,. \tag{7.108}$$

Этот расходящийся интеграл вычисляется так же, как и интеграл для $C_0^{(1)}(r)$:

$$\Delta C_{\text{т}}^{(2)}(r) = \frac{T}{2\pi\rho c^2} \ln \frac{L}{r} \,. \tag{7.109}$$

Табл. 7.1. Вклад тепловых и квантовых флуктуаций в корреляционную функцию

D	$C_0(r)$	$\Delta C_{\text{т}}(r)$
3	$\sim 1/r^2$	$\sim T/r$
2	$\sim 1/r$	$\sim T\ln(L/r)$
1	$\sim \ln(L/r)$	$\sim TL$

В. $D = 1$:

$$\Delta C^{(1)}_{\text{т}}(r) = \frac{T}{\pi\rho c^2}\int\limits_{\approx L^{-1}}^{\infty} \cos(kr)\,\frac{dk}{k^2} = \alpha\frac{TL}{\rho c^2}\,. \tag{7.110}$$

В этом случае интеграл при малых k расходится не логарифмически, а степенным образом. Поэтому определение коэффициента α в этом соотношении в общем виде невозможно: в частности, величина α зависит от граничных условий, а также от расположения точек, в которых измеряются смещения, по отношению к границе системы.

Полученные результаты позволяют исследовать вопрос о разрушении дальнего порядка квантовыми и тепловыми флуктуациями. Для этого необходимо изучить поведение $C_{\text{т}}(r)$ при $r \to \infty$. Если при этом $C_{\text{т}}(r) \to 0$, то дальний порядок флуктуациями не разрушается — даже значительное отклонение $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ от среднего значения не оказывает существенного влияния на $\mathbf{u}(\mathbf{r}')$ в далеких точках $\mathbf{r}'$. А вот если $C_{\text{т}}(r) \to \infty$, то это означает, что дальний порядок исчезает. Как видно из проделанных вычислений, такая ситуация имеет место для квантовых флуктуаций при $D = 1$, а для тепловых — при $D = 1, 2$.

Изучая результаты, сведенные в табл. 7.1, можно также сделать наблюдение, что с понижением размерности системы D смещения $\mathbf{u}$ в далеких точках становятся более скоррелированными. Объяснить это можно следующим образом. Представим себе одномерный кристалл, в котором взаимодействуют лишь ближайшие соседи. Предположим, что за счет флуктуаций один из атомов слегка сместился. Тогда соседние с ним атомы начнут подстраиваться под это новое «неправильное» положение. Затем перестроятся атомы, соседние с уже сместившимися, и так далее. Таким образом, смещение одного атома вызывает перестройку всей цепочки. Поэтому нескольких локальных флуктуаций оказывается достаточно, чтобы дальний порядок «забылся». Однако, с повышением размерности роль флуктуаций уменьшается, потому что каждый атом «слышит подсказку» о том, какое положения он должен был бы занять в идеальной решетке, от все большего числа соседей и более далеких атомов. Поэтому чем выше размерность, тем труднее перестроить систему, смещая один атом.

39 а. Запишем выражение для мацубаровского поляризационного оператора

$$\Pi(i\omega_n,\,k) = \frac{2T}{2\pi}\sum_{\omega_m}\int \frac{dp}{(i\omega_m + i\omega_n - \xi_{p+k})\ (i\omega_m - \xi_p)} \tag{7.111}$$

и найдем сумму по ω_m с помощью тождества (7.85), полученного в задаче 37б:

$$\Pi(i\omega_n, k) = \frac{1}{\pi}\int \frac{n_F(\xi_{p+k}) - n_F(\xi_p)}{i\omega_n - \xi_{p+k} + \xi_p}\, dp\,. \tag{7.112}$$

Нас интересуют значения k вблизи $\pm 2p_0$. Пользуясь четностью $\Pi(i\omega_n, k)$ по k, рассмотрим $k \approx 2p_0$ и введем обозначения:

$$k \equiv 2p_0 + q\,, \quad p \equiv -p_0 + x - q/2\,, \quad p + k \equiv p_0 + x + q/2\,. \tag{7.113}$$

При малых $|x|, |q| \ll p_0$ можно линеаризовать закон дисперсии. При этом

$$\Pi(i\omega_n, k = 2p_0 + q) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{n_F\left(v_F(x + q/2)\right) - n_F\left(-v_F(x - q/2)\right)}{i\omega_n - 2v_F x}\, dx\,. \tag{7.114}$$

Удобно переписать это выражение следующим образом:

$$\frac{\nu_{1D}}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \operatorname{th}\frac{\beta\xi}{2}\left(\frac{1}{i\omega_n - v_F q - 2\xi} + \frac{1}{i\omega_n + v_F q - 2\xi}\right) d\xi\,, \tag{7.115}$$

где $\xi = v_F x$, $\nu_{1D} = 1/(\pi v_F)$. Интеграл по ξ в (7.115) нетрудно вычислить, воспользовавшись известным представлением

$$\operatorname{th} z = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{z - \pi i(m + 1/2)}\,, \quad z = \beta\xi/2\,. \tag{7.116}$$

Получаем

$$-\frac{\nu_{1D}}{2}\sum_{m=0}^{m_*}\left(\frac{1}{m + 1/2 + w_+} + \frac{1}{m + 1/2 + w_-}\right)\,, \quad w_\pm = \frac{|\omega_n| \pm i v_F q}{4\pi T}\,. \tag{7.117}$$

Логарифмическая расходимость суммы по m должна быть обрезана так, чтобы максимальная энергия $E_0 = 2\pi T(2m_* + 1)$ была порядка E_F. (При энергиях $E > E_0$ линеаризованный закон дисперсии перестает быть справедливым.) Преобразуем сумму (7.117), прибавляя и вычитая значение выражения (7.117) при $w_\pm = 0$:

$$-\nu_{1D}\sum_{m=0}^{m_*}\frac{1}{m + 1/2} - \frac{\nu_{1D}}{2}\sum_{m=0}^{m_*}\left(\frac{1}{m + 1/2 + w_+} + \frac{1}{m + 1/2 + w_-} - \frac{2}{m + 1/2}\right)\,, \tag{7.118}$$

Удобство данного представления в том, что первая сумма не зависит от $w_\pm$, а вторая — сходится, и поэтому в ней можно распространить суммирование на произвольно большие m. Вычисляя первую сумму с логарифмической точностью, получаем окончательное выражение

$$\Pi(i\omega_n, k) = -\nu_{1D}\ln\frac{E_0}{4\pi T} + \frac{\nu_{1D}}{2}\left(\psi\left(\frac{1}{2} + w_+\right) + \psi\left(\frac{1}{2} + w_-\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right)\,, \tag{7.119}$$

где

$$\psi(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} = -\gamma - \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{k+z} - \frac{1}{k+1} \right) , \tag{7.120}$$

$\gamma = 0,5772157...$ — постоянная Эйлера.

Теперь найдем мацубаровскую функцию Грина фононов. Запишем для этого уравнение Дайсона:

$$D^{-1}(i\omega_n, k) = D_0^{-1}(i\omega_n, k) - g^2\Pi(i\omega_n, k) = -\frac{\omega_n^2 + \omega_0^2(k)}{\omega_0^2(k)} - g^2\Pi(i\omega_n, k)\,. \tag{7.121}$$

Получаем

$$D(i\omega_n, k) = -1/\left(1 + \omega_n^2/\omega_0^2(k) + g^2\Pi(i\omega_n, k)\right)\,. \tag{7.122}$$

Интересующая нас корреляционная функция смещений $\langle u_k(t)u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}}$ есть не что иное, как

$$\begin{aligned}\langle u_k(t)u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}} &= -T\sum_n \frac{1}{\rho\omega_0^2(k)} D(i\omega_n, k) = \\ &= \sum_n \frac{T}{\rho\omega_0^2(k)\left(1 + \omega_n^2/\omega_0^2(k) + g^2\Pi(i\omega_n, k)\right)}\end{aligned} \tag{7.123}$$

(см. решение задачи 38). При достаточно высокой температуре T в сумме (7.123) при всех n знаменатель дроби не обращается в нуль. Однако, поскольку при уменьшении T поляризационный оператор $\Pi(i\omega_n, k)$ становится все более и более отрицательным, при достижении некоторого значения $T = T_c$ один из членов в сумме по n может начать расходиться. Расходимость флуктуаций $\langle u_k(t)u_{-k}(t)\rangle_{\text{т}}$ свидетельствует о неустойчивости системы по отношению к возникновению модуляции с данным k.

Нетрудно показать, что чем меньше $|\omega_n|$, тем выше температура, при которой знаменатель выражения (7.123) обращается в нуль. Аналогично, максимальное значение температуры, при которой расходятся флуктуации, достигается при $k = 2p_0$. Поэтому волновой вектор модуляции, возникающей вследствие неустойчивости, есть $k = 2p_0$.

Иными словами, температура фазового перехода определяется из условия обращения в нуль частоты фононов с $k = 2p_0$. Подставляя $\omega_n = 0$ в (7.122), получаем условие на температуру перехода: $g^2\Pi_0 + 1 = 0$, где $\Pi_0 = \Pi(\omega_n = 0, k = 2p_0)$. Решая уравнение $g^2\nu_{1D}\ln(E_0/T_c) = 1$, находим

$$T_c \approx E_0 e^{-1/g^2\nu_{1D}}\,. \tag{7.124}$$

Заметим, что температура перехода T_c по порядку величины совпадает с выражением (6.81) для щели Δ_0 при $T = 0$.

39 б. Нас интересует окрестность температуры перехода T_c, при которой в сумме (7.123) расходится член с $n = 0$. При этом существенно то, что поскольку последовательность частот $\omega_n = 2\pi Tn$ дискретна, слагаемые с $n \neq 0$ имеют регулярное поведение в окрестности $k = \pm 2p_0$. Поэтому ими можно пренебречь по сравнению с особым вкладом с $n = 0$.

Поэтому рассмотрим поляризационный оператор $\Pi(i\omega_n, k)$ при $\omega_n = 0$ и k в окрестности $2p_0$. Разлагая выражение (7.119) при малом $q = k - 2p_0$, получаем

$$\Pi(q) \equiv \Pi(\omega_n = 0, k = 2p_0 + q) = -\nu_{1D} \left(\ln \frac{E_0}{4\pi T} - aq^2 \right) , \quad a = -\frac{v_F^2 \psi''(\frac{1}{2})}{(4\pi T)^2} , \qquad (7.125)$$

причем, согласно (7.120), величина $\psi''(1/2)$ есть

$$\psi''(1/2) = -2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k + \frac{1}{2})^3} = -2(2^3 - 1)\zeta(3) = -14\zeta(3) . \qquad (7.126)$$

Подставим разложение $\Pi(q)$ в коррелятор смещений (7.123), оставляя только член суммы с $n = 0$, и примем во внимание, что при $T = T_c$ выполняется равенство $1 + g^2 \Pi(q = 0) = 0$. Получается следующее выражение:

$$\langle u_k(t) u_{-k}(t) \rangle_{\text{т}} = \frac{T}{g^2 \nu_{1D} \rho \omega_0^2(2p_0) \left(\ln(T/T_c) + aq^2 \right) .} \qquad (7.127)$$

При T вблизи T_c разлагаем $\tau \equiv \ln(T/T_c) = (T - T_c)/T_c$. Получаем искомый лоренцев спектр (7.36) флуктуаций (7.33) поля $Q(r, t)$:

$$\langle Q_q(t) Q_{-q}(t) \rangle_{\text{т}} = \frac{A}{\tau + aq^2} , \quad A = \frac{T_c}{g^2 \nu_{1D} \rho \omega_0^2(2p_0)} . \qquad (7.128)$$

Чтобы получить коррелятор поля смещений $u(x, t)$, заметим, что зависимость (7.128) имеет место как в окрестности $k \approx 2p_0$, так и в окрестности $k \approx -2p_0$. Поэтому

$$C_{\text{т}}(r) = \int \frac{A}{\tau + aq^2} \left(e^{i(q+2p_0)r} + e^{i(q-2p_0)r} \right) \frac{dq}{2\pi} = \frac{A}{\tau b_{\text{т}}} e^{-|r|/b_{\text{т}}} \cos(2p_0 r) , \qquad (7.129)$$

где $b_{\text{т}} = (a/\tau)^{1/2}$ — так называемая *корреляционная длина*. Обратим внимание на то, что корреляционная длина $b_{\text{т}}$ обращается в бесконечность при приближении к T_c и корреляционная функция $C_{\text{т}}(r)$ перестает экспоненциально убывать. Это типичное для фазовых переходов второго рода проявление возникновения дальнего порядка в системе.

Рассмотренная задача иллюстрирует общий метод исследования фазовых переходов второго рода с помощью диаграммной техники. Вначале нужно исследовать флуктуации параметра порядка в квадратичном приближении. (В данном случае параметром порядка является фурье-компонента смещения решетки с волновым вектором $k = 2p_0$.) Если фазовый переход действительно имеет место, то должна существовать температура, при которой система «размягчается» настолько, что корреляционная функция в импульсном представлении обращается в бесконечность. Это и есть температура перехода, полученная в рамках теории среднего поля.

Следующим шагом (который мы здесь не сделали) должно быть изучение длинноволновых флуктуаций параметра порядка. Взаимодействие флуктуаций друг с другом описывается диаграммой, показанной на рис. 7.4 (индексы $\pm$ обозначают электроны с импульсами $\pm p_0$), а также подобными ей более сложными диаграммами. Эффекты взаимодействия флуктуаций важны для правильного понимания термодинамики системы в окрестности фазового перехода.

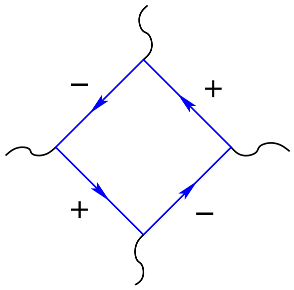


Рис. 7.4

40 а. Покажем, что аналитическое продолжение мацубаровской функции Грина $G(i\omega_n, \mathbf{p})$ с верхней (нижней) мнимой полуоси дает запаздывающую (опережающую) функцию Грина $G^{R(A)}(\omega, \mathbf{p})$. Будем действовать по той же схеме, что и в задаче 37. Мы рассмотрим лишь случай фермионов, ибо для случая бозе-частиц доказательство получается аналогично.

Выразим запаздывающую и опережающую функции Грина (7.21), (7.22) через матричные элементы $\langle n|\widehat{\psi}|m\rangle$ в базисе собственных состояний. Выражая средние в (7.21), (7.22) через след и производя точно такие же преобразования, как в задаче 37, получим

$$G^{R(A)}(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = Z^{-1} \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{\omega - \omega_{nm} \pm i0} \langle n|\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}')|m\rangle\langle m|\widehat{\psi}(\mathbf{r})|n\rangle\,, \tag{7.130}$$

где $\omega_{nm} = E_n - E_m$. Вычисление мацубаровской функции Грина

$$G(i\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_n \tau} \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{\psi}_M(\mathbf{r}, \tau)\, \widehat{\psi}^+_M(\mathbf{r}', 0)\rangle_{\text{т}}\, d\tau \tag{7.131}$$

также совершенно аналогично тому, которое было проделано в задаче 37. Результат таков:

$$G(i\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = Z^{-1} \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}}{i\omega_n - \omega_{nm}} \langle n|\widehat{\psi}^+(\mathbf{r}')|m\rangle\langle m|\widehat{\psi}(\mathbf{r})|n\rangle\,. \tag{7.132}$$

Сравнивая это выражение с (7.130) и рассуждая так же, как в задаче 37, убеждаемся в том, что аналитическое продолжение $G(i\omega_n, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ с верхней мнимой полуоси дает $G^R(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, а с нижней — $G^A(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$.

40 б. *(Первое решение.)* Перепишем мацубаровскую собственно–энергетическую часть (7.37), выразив при помощи интегрального представления (7.24) мацубаровские функции Грина через соответствующие запаздывающие функции. Получаем

$$\Sigma(i\varepsilon_n, \mathbf{p}) = -g^2 T \sum_{\varepsilon'_m} \int \frac{\operatorname{Im} G_n^R(x, \mathbf{p}_1)}{x - i\varepsilon'_m} \frac{\operatorname{Im} D^R(\omega, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{\omega - i\varepsilon_n + i\varepsilon'_m} \frac{dx d\omega}{\pi^2} \frac{d^3\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3}, \tag{7.133}$$

где оба интеграла по $dx\, d\omega$ берутся по всей вещественной оси. Мацубаровскую сумму по ε'_m можно вычислить с помощью разложения на простейшие дроби:

$$\mathcal{F} = T \sum_{\varepsilon'_m} \frac{1}{x - i\varepsilon'_m} \frac{1}{\omega - i\varepsilon_n + i\varepsilon'_m} = \frac{T}{\omega + x - i\varepsilon_n} \sum_{\varepsilon'_m} \left(\frac{1}{x - i\varepsilon'_m} + \frac{1}{\omega - i\varepsilon_n + i\varepsilon'_m} \right). \tag{7.134}$$

Исходная мацубаровская сумма сходится, но каждая из сумм в (7.134) расходится. Поэтому добавим в (7.134) множитель сходимости $\exp(i\varepsilon'_m \tau)$, где $\tau \to +0$. Тогда величину $i\varepsilon_n$ во втором слагаемом можно исключить, сдвинув переменную суммирования. После этого сдвига суммирование будет происходить уже не по фермиевским, а по бозевским частотам, так как обе мацубаровские частоты ε_n и ε'_m нечетны. Кроме того, каждый из членов в (7.134) можно представить как значение мацубаровской функции Грина в совпадающие моменты времени для системы с одним уровнем (в первом слагаемом энергия уровня равна $(-x)$, а во втором — ω). Поэтому сумма (7.134) выражается через числа заполнения:

$$\mathcal{F} = \frac{n_F(-x) + n_B(\omega)}{\omega + x - i\varepsilon_n} = \frac{1}{2(\omega + x - i\varepsilon_n)} \left(\operatorname{th} \frac{x}{2T} + \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \right) \tag{7.135}$$

Продолжение полученного выражения на вещественную ось выполняется с помощью замены $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i0$. Таким образом, получаем требуемое выражение для запаздывающей функции

$$\Sigma^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = g^2 \int \frac{\operatorname{Im} G_n^R(x, \mathbf{p}_1)\ \operatorname{Im} D^R(\omega, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)}{\varepsilon - \omega - x + i0} \left(\operatorname{th} \frac{x}{2T} + \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \right) \frac{d^3\mathbf{p}_1\, d\omega dx}{\pi (2\pi)^4}. \tag{7.136}$$

40 б. *(Второе решение.)* Чтобы использовать аналитические свойства мацубаровских функций, применим стандартный прием, позволяющий преобразовать сумму (7.37) в контурный интеграл. Рассмотрим сумму

$$S = T \sum_{\varepsilon_1} G(\varepsilon_1, \mathbf{p}_1) D(\varepsilon - \varepsilon_1, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1), \tag{7.137}$$

где суммирование происходит по $\varepsilon_1 = (2n+1)\, i\pi T$. Для определенности будем считать, что ε лежит в верхней полуплоскости. Одновременно рассмотрим функцию

$$f(z) = G(z, \mathbf{p}_1)\, D(\varepsilon - z, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)\ \operatorname{th} \frac{z}{2T}, \tag{7.138}$$

имеющую полюсы при $z = \pi T(2n+1)i$. Вычислим интеграл

$$I = \oint\limits_C f(z)\, dz\,, \tag{7.139}$$

взятый по контуру C, изображенному на рис. 7.5.

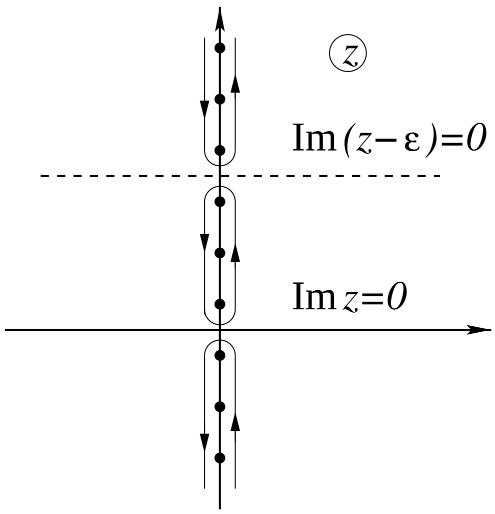


Рис. 7.5

Заметим, что в каждой из трех областей $\operatorname{Im} z < 0$, $0 < \operatorname{Im} z < \operatorname{Im}\varepsilon$, $\operatorname{Im}\varepsilon < \operatorname{Im} z$ функция $f(z)$ допускает аналитическое продолжение с дискретных точек на мнимой оси во всю область. Это позволяет вычислить контурный интеграл с помощью теории вычетов. Вычет $f(z)$ в полюсе $z_n = \pi Ti(2n+1)$ равен

$$\operatorname*{Res}_{z=z_n} f(z) = 2\, T\, G(z_n, \mathbf{p}_1)\, D(\varepsilon - z_n, \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)\,. \tag{7.140}$$

Поэтому $I = 4\pi i S$.

В то же время аналитичность $f(z)$ позволяет деформировать контур интегрирования, как показано на рис. 7.6.

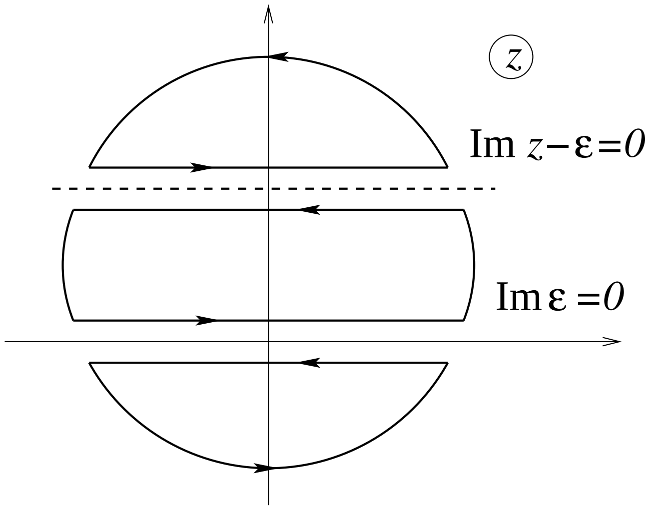


Рис. 7.6

Таким образом интеграл по контуру C сводится к двум интегралам вперед и назад по горизонтальным прямым $z = x$ и $z = \varepsilon + x$, $-\infty < x < \infty$, и мы приходим к равенству:

$$I = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left[\left(G^R(x) - G^A(x) \right) D^R(\varepsilon - x) \operatorname{th} \frac{x}{2T} - G^R(x+\varepsilon) \left(D^R(x) - D^A(x) \right) \operatorname{th} \frac{\varepsilon + x}{2T} \right] dx \,. \tag{7.141}$$

Зависимость гриновских функций от импульсов, опущенная в (7.141) для краткости, будет восстановлена ниже. Заметим, что поскольку $\varepsilon = i\pi T(2n+1)$, в выражении (7.141) можно заменить $\operatorname{th}[(\varepsilon + x)/2T]$ на $-\operatorname{cth}[x/2T]$.

Выразим теперь все стоящие здесь величины через мнимые части функций Грина. Из (7.130) видно, что опережающая и запаздывающая функции Грина отличаются лишь знаком перед $i0$, поэтому

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) - G^A(\varepsilon, \mathbf{p}) = 2i \operatorname{Im} G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) \,. \tag{7.142}$$

Кроме того, из аналитических свойств функций Грина следует, что они удовлетворяют соотношениям типа Крамерса–Кронига:

$$G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(\omega, \mathbf{p})}{\omega - \varepsilon - i0} \, d\omega \,, \quad G^A(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(\omega, \mathbf{p})}{\omega - \varepsilon + i0} \, d\omega \,. \tag{7.143}$$

Подставляя эти выражения в (7.141), получаем

$$I = \frac{2i}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\operatorname{Im} G^R(x) \operatorname{Im} D^R(\omega)}{\omega - \varepsilon + x - i0} \operatorname{th} \frac{x}{2T} + \frac{\operatorname{Im} G^R(\omega) \operatorname{Im} D^R(x)}{\omega - \varepsilon - x - i0} \operatorname{cth} \frac{x}{2T} \right) dx d\omega \,. \tag{7.144}$$

Воспользовавшись соотношением $\operatorname{Im} D^R(-x) = -\operatorname{Im} D^R(x)$, сделаем во втором слагаемом замену $x \to -x$, после чего поменяем местами в этом слагаемом переменные x и ω. Получаем окончательный результат:

$$I = \frac{2i}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} G^R(x) \operatorname{Im} D^R(\omega)}{\omega - \varepsilon + x - i0} \left(\operatorname{th} \frac{x}{2T} + \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \right) dx d\omega \,. \qquad (7.145)$$

Теперь, пользуясь соотношением $I = 4\pi i S$, находим S. Восстанавливая зависимость от импульсов $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}_1$ и интегрируя по $d^3\mathbf{p}_1$, получаем искомое сотношение (7.38).

Как уже было отмечено, равенство (7.38) имеет совершенно общий характер и не зависит от конкретного вида функций Грина $G^R(\varepsilon, \mathbf{p})$ и $D^R(\omega, \mathbf{p})$. Применение соотношения (7.38), однако, оказывается особенно удобным в случае свободных частиц, поскольку при этом мнимые части затравочных функций $G^R(\varepsilon, \mathbf{p})$ и $D^R(\omega, \mathbf{p})$ пропорциональны δ-функциям — см. задачу 41 б.

41 а. Запаздывающая функция Грина может быть получена из мацубаровской функции (7.122) аналитическим продолжением с дискретных частот $\omega_n \geqslant 0$. Выполняя замену $i\omega_n \to \omega$ в поляризационном операторе (7.119) и разлагая по малым ω и $q = k - 2p_0$, получаем [10]

$$\Pi(i\omega_n, k) = -\nu_{1D} \left(\ln \frac{E_0}{4\pi T} - aq^2 + ib\omega \right) , \quad b = \frac{\psi'(\frac{1}{2})}{4\pi T} , \quad a = -\frac{v_F^2 \psi''(\frac{1}{2})}{(4\pi T)^2} \,. \qquad (7.146)$$

Подставляя это разложение в (7.122) и учитывая, что при $T = T_c$ имеет место равенство $1 + g^2 \Pi_0 = 0$, получаем выражение для запаздывающей функции Грина:

$$D(\omega, k = 2p_0 + q) = - \left[g^2 \nu_{1D} \left(\ln(T/T_c) + aq^2 - ib\omega \right) - \omega^2/\omega_0^2(k) \right]^{-1} \,. \qquad (7.147)$$

При $T \to T_c$ разлагаем $\ln(T/T_c) = (T - T_c)/T_c \equiv \tau$. Поскольку в этой области характерные ω малы, второе слагаемое в знаменателе выражения (7.147) несущественно, и в результате функция Грина есть

$$D(\omega, k = 2p_0 + q) = \frac{1}{g^2 \nu_{1D} b \left(i\omega - \gamma(q) \right)} \,, \qquad \gamma(q) = (\tau + aq^2)/b \,. \qquad (7.148)$$

Полюсы этого выражения определяют закон дисперсии вблизи T_c. Как видно, частота оказывается чисто мнимой: $\omega(q) = -i\gamma(q)$. Это соответствует релаксационной динамике: возмущение с волновым вектором $k = 2p_0 + q$ затухает по закону $e^{-\gamma(q)t}$,

Решение 41 б. Найдем собственно-энергетическую часть (7.38) функции Грина одномерных фермионов. Для определенности будем говорить о движущихся направо частицах с линеаризованным законом дисперсии $\varepsilon = v_F p$. Рассеиваясь на мягких фононах с передачей импульса близкого к $-2p_0$, правые «частицы» становятся «левыми» с законом дисперсии $\varepsilon = -v_F p$. Соответственно в выражении (7.38) мнимая

[10] Согласно (7.120), $\psi'(1/2) = 3\zeta(2)$, $\psi''(1/2) = -14\zeta(3)$.

часть функции Грина электронов есть $-\pi\delta(\varepsilon_1 + v_F p_1)$. Интегрируя δ-функцию по ε_1, получаем

$$\Sigma^R(\varepsilon, p) = -\frac{g^2}{2\pi} \int \frac{dp_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} D^R(\omega, p - p_1)}{\varepsilon + v_F p_1 - \omega + i0} \left(\operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} - \operatorname{th} \frac{v_F p_1}{2T} \right) d\omega\,. \tag{7.149}$$

Мнимая часть функции Грина фононов, согласно (7.148), есть

$$\operatorname{Im} D^R(\omega, q) = -\frac{1}{2bg^2\nu_{1D}} \left(\frac{1}{\omega + i\gamma(q)} + \frac{1}{\omega - i\gamma(q)} \right) = -\frac{\omega}{bg^2\nu_{1D}(\omega^2 + \gamma^2(q))}\,. \tag{7.150}$$

Поскольку $\gamma(q = 0) = \tau/b \ll T$, основной вклад в интеграл (7.149) дает область $|\omega| \ll T$. Поэтому можно заменить $\operatorname{cth} \omega/2T$ на $2T/\omega$, что физически соответствует переходу от рассеяния на квантовомеханических фононах к рассеянию на классическом поле. Получающийся в результате сделанного приближения интеграл по ω находится с помощью метода вычетов:

$$\Sigma^R(\varepsilon, p) = \frac{2\pi i}{bg^2\nu_{1D}} \frac{g^2}{2\pi} \int \frac{1}{\tilde{\varepsilon} + v_F q + i\gamma(q)} \left(\frac{2T}{i\gamma(q)} + \operatorname{th} \frac{v_F(q+p)}{2T} \right) \frac{dq}{2\pi}\,, \tag{7.151}$$

где $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon + v_F p$, $q = p_1 - p$. Интеграл по q в (7.151) определяется областью $|q| \leqslant (\tau/a)^{1/2} \ll v_F/T$. Поэтому можно пренебречь слагаемым $\operatorname{th}(v_F(q+p)/2T)$ по сравнению с членом $2T/\gamma(q)$, а также — заменить $i\gamma(q)$ в знаменателе первого сомножителя (7.151) на $i0$. В результате

$$\Sigma^R(\varepsilon, p) = \frac{2T}{\pi\nu_{1D}} \int \frac{dq}{(\tilde{\varepsilon} + v_F q + i0)(\tau + aq^2)} = -\frac{2T}{a\nu_{1D}\lambda(\tilde{\varepsilon} + iv_F\lambda)}\,, \tag{7.152}$$

где $\lambda = (\tau/a)^{1/2}$.

Представляет интерес мнимая часть выражения (7.152), описывающая релаксацию электронного импульса из-за рассеяния на мягких фононах:

$$\operatorname{Im} \Sigma^R(\varepsilon, p) = -\frac{2\pi T}{(a(p + \varepsilon/v_F)^2 + \tau)}\,, \tag{7.153}$$

Время жизни квазичастицы с малой энергией $\varepsilon = v_F p \to 0$, согласно (7.153), оказывается весьма коротким, порядка $\tau/T = (T - T_c)/T_c^2$.

Вообще, как следует из (7.153), рассеяние на мягких фононах существенно меняет функцию Грина в области $|\varepsilon| \leqslant T_c$, $|p| \leqslant T_c/v_F$, поскольку при таких ε и p величина $\Sigma^R(\varepsilon, p)$ оказывается больше характерной энергии квазичастиц. Поэтому наши выводы о поведении $G^R(\varepsilon, p)$ и $\Sigma^R(\varepsilon, p)$ в этой области, основанные на использовании в выражении (7.38) функции Грина свободных электронов, вообще говоря, не имеют количественного смысла. Чтобы получить более надежные результаты, следует использовать перенормированную функцию Грина, в которую включена собственно-энергетическая часть. При этом соотношение (7.38) становится уравнением самосогласования для $\Sigma^R(\varepsilon, p)$.

42. Нас интересует взаимодействие атомов, находящихся в равновесии с тепловым распределением фотонов. Гамильтониан взаимодействия атомов с внешним электрическим полем есть

$$\widehat{V} = -\widehat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_1)\,\widehat{\mathbf{d}}^{(1)} - \widehat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_2)\,\widehat{\mathbf{d}}^{(2)} = \sum_{i=1,2;\,\alpha=x,y,z} \widehat{E}_\alpha(\mathbf{r}_i)\,\widehat{d}_\alpha^{(i)}\,, \tag{7.154}$$

где $\mathbf{d}^{(1,2)}$ — операторы дипольного момента атомов, а $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ — оператор электрического поля в точке $\mathbf{r}$.

Изменение термодинамического потенциала системы, вызванное взаимодействием (7.154), можно записать так:

$$U \equiv \Omega - \Omega_0 = -T\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int\limits_0^\beta \ldots \int\limits_0^\beta \langle \mathrm{T}_\tau\ \widehat{V}(\tau_1)\ldots\ \widehat{V}(\tau_n)\rangle_{\text{т}}\,d\tau_1\ldots d\tau_n\,, \tag{7.155}$$

причем усреднение происходит как по флуктуациям дипольных моментов, так и по флуктуациям электрического поля. Нас интересует слагаемое в (7.155), отвечающее взаимодействию двух атомов. Поскольку средний дипольный момент атома равен нулю, очевидно, что интересующие нас члены должны содержать каждый из дипольных моментов $\mathbf{d}^{(1)}$ и $\mathbf{d}^{(2)}$ четное число раз. Поэтому наименьшим порядком теории возмущений, дающим отличный от нуля вклад, оказывается четвертый:

$$U = -\frac{T}{4!}\int\limits_0^\beta \ldots \int\limits_0^\beta \langle \mathrm{T}_\tau\ \widehat{V}(\tau_1)\ldots\ \widehat{V}(\tau_4)\rangle_{\text{т}}\,d\tau_1\ldots d\tau_4\,. \tag{7.156}$$

Для вклада в $\Omega-\Omega_0$ порядка n имеется $(n-1)!$ комбинаторных возможностей для образования неприводимого среднего. В нашем случае $n=4$, и комбинаторный множитель равен $3! = 6$. Кроме того, чтобы исключить эффекты самодействия атомов, мы должны выделить слагаемые, содержащее каждый из дипольных моментов $\mathbf{d}^{(1)}$ и $\mathbf{d}^{(2)}$ по два раза. Это дает еще две возможности для каждого из учтенных неприводимых средних. В результате полное число вкладов интересующего нас вида равно $3!\cdot 2 = 12$. Кроме того, усреднения по флуктуациям дипольных моментов различных атомов статистически независимы, а усреднение по флуктуациям электрического поля можно выполнить по теореме Вика. Таким образом,

$$U_{12} = -\frac{T}{2}\int\limits_0^\beta \ldots \int\limits_0^\beta \langle \mathrm{T}_\tau\,\widehat{d}_\alpha^{(1)}(\tau_1)\,\widehat{d}_\beta^{(1)}(\tau_2)\rangle_{\text{т}}\,\langle \mathrm{T}_\tau\,\widehat{d}_\gamma^{(2)}(\tau_3)\,\widehat{d}_\delta^{(2)}(\tau_4)\rangle_{\text{т}}\times$$
$$\times\langle \mathrm{T}_\tau\,\widehat{E}_\alpha(\mathbf{r}_1,\,\tau_1)\,\widehat{E}_\gamma(\mathbf{r}_2,\,\tau_3)\rangle_{\text{т}}\,\langle \mathrm{T}_\tau\,\widehat{E}_\beta(\mathbf{r}_1,\,\tau_2)\,\widehat{E}_\delta(\mathbf{r}_2,\,\tau_4)\rangle_{\text{т}}d\tau_1\ldots d\tau_4\,.$$

Введем обозначения для коррелятора дипольных моментов:

$$\alpha_{\alpha\beta}^{(j)}(\tau) = \langle \mathrm{T}_\tau\,\widehat{d}_\alpha^{(j)}(0)\,\widehat{d}_\beta^{(j)}(\tau)\rangle_{\text{т}}\,,\qquad j=1,2\,, \tag{7.157}$$

и электрических полей:

$$D^E_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\,\tau) = \langle \mathrm{T}_\tau\, \widehat{E}_\alpha(0,0)\, \widehat{E}_\beta(\mathbf{r},\,\tau)\rangle_{\mathrm{T}}\,. \tag{7.158}$$

Для простоты будем считать, что атомы находятся в синглетном состоянии. Тогда

$$\alpha^{(j)}_{\alpha\beta}(\tau) = \alpha_j(\tau)\,\delta_{\alpha\beta}\,, \tag{7.159}$$

и взаимодействие U_{12} принимает следующий вид:

$$U_{12} = -\frac{T}{2}\int\limits_0^\beta \cdots \int\limits_0^\beta \alpha_1(\tau_1-\tau_2)\,\alpha_2(\tau_3-\tau_4)\,D^E_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\tau_1-\tau_3)\,D^E_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\tau_4-\tau_2)\,d\tau_4\ldots d\tau_1\,. \tag{7.160}$$

Перейдем к мацубаровскому частотному представлению:

$$\alpha(\tau) = T\sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau}\,\alpha(i\omega_n)\,. \tag{7.161}$$

Интегрирование по τ делает все частоты в выражении (7.160) равными, и мы получаем

$$U_{12} = -\frac{T}{2}\sum_{\omega_n}\alpha_1(i\omega_n)\,\alpha_2(i\omega_n)\,\left[D^E_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r})\right]^2\,. \tag{7.162}$$

(Здесь мы воспользовались четностью мацубаровских корреляционных функций по частоте.)

Функцию $D^E_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r})$ можно легко связать с функцией Грина (7.39), приведенной в условии. Поскольку в выбранной нами калибровке $\Phi = 0$, то $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}/c$. Поэтому

$$D^E_{\alpha\beta}(i\omega_n,\mathbf{r}) = \frac{\omega_n^2}{c^2}D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r}) \tag{7.163}$$

и выражение для энергии перепишется как

$$U_{12} = -\frac{T}{2}\sum_{\omega_n}\frac{\omega_n^4}{c^4}\alpha_1(i\omega_n)\,\alpha_2(i\omega_n)\,\left[D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r}_{12})\right]^2\,. \tag{7.164}$$

Чтобы найти функцию $D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\,\mathbf{r})$, перейдем из импульсного представления в координатное, заменяя в выражении (7.39) компоненты вектора $\mathbf{k}$ на пространственные производные по правилу: $k_\alpha \to -i\partial/\partial x_\alpha$. Получаем

$$D_{\alpha\beta}(i\omega_n,\mathbf{r}) = -4\pi\left[\delta_{\alpha\beta} - \frac{c^2}{\omega_n^2}\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}\right]\int\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2+\omega_n^2/c^2}\,\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,. \tag{7.165}$$

Вычислим интеграл

$$I = \int\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2+a^2}\,\frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{1}{2\pi^2}\int\limits_0^\infty\frac{\sin kr}{kr}\,\frac{k^2\,dk}{k^2+a^2} =$$

$$= -\frac{1}{2\pi^2 r}\frac{\partial}{\partial r}\int\limits_0^\infty \frac{\cos kr}{k^2+a^2}\,dk = -\frac{1}{2\pi^2 r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{\pi}{2a}e^{-ar} = \frac{1}{4\pi r}e^{-ar}\,. \qquad (7.166)$$

Наконец, дифференцирование дает

$$D_{\alpha\beta}(i\omega_n, \mathbf{r}) = \frac{e^{-k_n r}}{k_n^2 r^3}\left[\delta_{\alpha\beta}\left(1 + k_n r + k_n^2 r^2\right) - n_\alpha\, n_\beta\left(3 + 3k_n r + k_n^2 r^2\right)\right]\,, \qquad (7.167)$$

где $k_n = |\omega_n|/c$. Получаем, что величина, входящая в выражение (7.164) для U_{12} есть

$$K(\omega_n,\, r) = k_n^4\left[D_{\alpha\beta}(i\omega_n, \mathbf{r})\right]^2 = \frac{2e^{-2k_n r}}{r^6}\left(3 + 6k_n r + 5k_n^2 r^2 + 2k_n^3 r^3 + k_n^4 r^4\right)\,. \qquad (7.168)$$

Перед тем, как непосредственно приступить к вычислению U_{12}, свяжем мацубаровские функции $\alpha_{(1,2)}(i\omega_n)$ с поляризуемостью атомов. Это возможно, поскольку определяемая по формуле Кубо поляризуемость есть

$$\alpha_{\alpha\beta}(\omega) = i\int\limits_0^\infty e^{i\omega t}\langle[d_\alpha(t),\, d_\beta(0)]\rangle_{\text{т}}\,dt\,. \qquad (7.169)$$

Выражение (7.169) при аналитическом продолжении на верхнюю мнимую полуось дает как раз мацубаровскую функцию $\alpha(i\omega_n)$. Воспользовавшись этим, выразим $\alpha(i\omega_n)$ через $\alpha(\omega)$. При $\omega_n > 0$ по формуле Крамерса–Кронига имеем

$$\alpha(i\omega_n) = \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha''(\omega)}{\omega - i\omega_n}\,d\omega = \frac{2}{\pi}\int\limits_0^\infty \frac{\omega\alpha''(\omega)}{\omega_n^2 + \omega^2}\,d\omega\,, \qquad (7.170)$$

где $\alpha''(\omega)$ — мнимая часть поляризуемости (мы воспользовались здесь ее нечетностью). Таким образом, получаем окончательный результат:

$$U_{12} = -\frac{2T}{\pi^2}\sum_{\omega_n}\int\limits_0^\infty\int\limits_0^\infty K(\omega_n,\, r)\frac{\omega_1\,\omega_2\,\alpha_1(\omega_1)\,\alpha_2(\omega_2)}{(\omega_n^2+\omega_1^2)\,(\omega_n^2+\omega_2^2)}\,d\omega_1\,d\omega_2\,. \qquad (7.171)$$

Общее выражение (7.171) справедливо при произвольном расстоянии между атомами. Это выражение упрощается в нескольких интересных предельных случаях. Определим характерные длины

$$\lambda_0 = c/\omega_0\,, \quad \lambda_T = c/T\,, \qquad (7.172)$$

где ω_0 — частота, определяемая частотной дисперсией поляризуемости (фактически, в атомных единицах всегда $\omega_0 \sim 1$). Поскольку λ_0 много больше радиуса атомов, а λ_T, в свою очередь, много больше λ_0, имеется три различные области,

А: $r \ll \lambda_0$; **Б:** $\lambda_0 \ll r \ll \lambda_T$; **В:** $\lambda_T \ll r$.

Рассмотрим по отдельности каждый из этих случаев.

А: В этом случае $k_n r \ll 1$, т. е. запаздывание электромагнитного взаимодействия пренебрежимо мало. Согласно (7.168), при этом $K(\omega_n,\, r) = 6/r^6$.

Поскольку в этой области $k_n \lambda_T \ll 1$, мацубаровскую сумму можно заменить на интеграл по ω:

$$U(r) = -\frac{12\hbar}{\pi^3\, r^6} \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \frac{\omega_1\, \omega_2\, \alpha''(\omega_1)\, \alpha''(\omega_2)}{(\omega^2+\omega_1^2)\,(\omega^2+\omega_2^2)}\, d\omega_1\, d\omega_2\, d\omega\,. \tag{7.173}$$

Интегрируя по ω, получаем: [11]

$$U(r) = -\frac{6\hbar}{\pi^2\, r^6} \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty \frac{\alpha''(\omega_1)\, \alpha''(\omega_2)}{\omega_1+\omega_2}\, d\omega_1\, d\omega_2\,. \tag{7.174}$$

В области $r \ll \lambda_0$ ван-дер-ваальсово взаимодействие можно вывести и без использования диаграммной техники. Чтобы получить выражение (7.174), надо найти сдвиг энергии основного состояния двух атомов по квантовомеханической теории возмущений:

$$\delta E_0 = -\sum_{m\neq 0} \frac{|\langle m|\widehat{\mathcal{H}}_{12}|0\rangle|^2}{E_m - E_0}\,, \tag{7.175}$$

где

$$\widehat{\mathcal{H}}_{12} = \frac{1}{r_{12}^3}\,[\hat{\mathbf{p}}_1\hat{\mathbf{p}}_2 - 3(\hat{\mathbf{p}}_1\mathbf{n})(\hat{\mathbf{p}}_2\mathbf{n})] \tag{7.176}$$

— гамильтониан дипольного взаимодействия двух атомов в пренебрежении запаздыванием.

Б: В этом случае $k_n \lambda_0 \gg 1$ и, значит, необходимо учитывать запаздывание электромагнитного взаимодействия. В то же время, поскольку $k_n \lambda_T \ll 1$, температура по-прежнему эффективно мала, и мацубаровскую сумму в (7.171) можно заменить на интеграл. Этот интеграл определяется областью частот $\omega_n \approx c/r \ll \omega_0$ (из-за экспоненциального множителя в $K(\omega,\, r)$), вследствие чего можно пренебречь ω_n в знаменателях (7.171). В результате интегрирование по $\omega_{1,2}$ даст $\alpha_{1,2}(0)$ в силу соотношений Крамерса–Кронига. Остающийся интеграл по ω в выражении для взаимодействия,

$$U(r) = -\frac{\alpha_1(0)\, \alpha_2(0)}{2\pi} \int\limits_0^\infty K(\omega,\, r)\, d\omega\,, \tag{7.177}$$

вычисляется с использованием формулы

$$\int\limits_0^\infty x^m\, e^{-ax}\, dx = \frac{m!}{a^{m+1}}\,. \tag{7.178}$$

[11] Соотношения (7.174) и (7.179) были получены Лондоном (1930) и Польдером и Казимиром (1948) — подробнее см. [1], гл. VI; [9], § 85.

В результате получаем так называемое *взаимодействие Казимира*:

$$U(r) = -\frac{23\hbar c\,\alpha_1(0)\,\alpha_2(0)}{4\pi r^7}\,. \tag{7.179}$$

Отметим, что в области $r \gg \lambda_0$ существенно запаздывание электромагнитного взаимодействия и квантовомеханичность фотонов. Формально это проявляется в том, что взаимодействие (7.179) явно зависит от скорости света и постоянной Планка. Физически сила Казимира (7.179) возникает из-за квантовых флуктуаций электромагнитого излучения в вакууме при $T = 0$.

B: При $r \gg \lambda_T$ все члены в выражении (7.168) с $\omega_n \neq 0$ оказываются экспоненциально малыми. Поэтому в мацубаровской сумме в (7.171) достаточно оставить лишь член с $n = 0$. Тогда интегрирования по $\omega_{1,2}$ дадут, как и раньше, статическую поляризуемость, а в $K(r)_{\omega_n=0}$ достаточно удержать лишь первый член $6/r^6$. Получаем

$$U(r) = -3\,T\,\alpha_1(0)\,\alpha_2(0)/r^6\,. \tag{7.180}$$

Выражение (7.180), соответствующее пределу «высокой» температуры $T \gg c/r$, по существу элементарно. Его можно получить в рамках классической статистической физики, рассматривая взаимодейстие классических диполей (7.176). Термодинамическое среднее выражения (7.176) равно нулю. Поэтому энергия взаимодействия дается вторым порядком термодинамической теории возмущений:

$$U(r) = -\frac{1}{2T}\,\langle \mathcal{H}_{12}^2 \rangle_{\text{т}}\,. \tag{7.181}$$

Среднеквадратичные флуктуации дипольного момента можно найти с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы (или даже с помощью теоремы о равнораспределении):

$$\langle d_\alpha\, d_\beta \rangle_{\text{т}} = T\,\alpha(0)\,\delta_{\alpha\beta}\,. \tag{7.182}$$

В результате получается классическое выражение (7.180).