



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ДИАГРАММЫ ФЕЙНМАНА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

МОСТОВОЙ
СЕРГЕЙ ДМИТРИЕВИЧ

ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ
НА [VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ
[VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА
СТУДЕНТКУ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ
ГОЛОВКО ПОЛИНУ ВАЛЕРЬЕВНУ



Содержание

1 Введение. Предмет курса. Одночастичные состояния. Представление вторичного квантования.	7
1.1 Введение	7
1.1.1 Предмет курса	7
1.1.2 Одночастичное состояние	10
1.1.3 Представление вторичного квантования	12
1.1.4 Одночастичные операторы в представлении вторичного квантования	12
1.1.5 Двухчастичные операторы в представлении вторичного квантования	14
2 Одночастичные операторы в представлении вторичного квантования. Двухчастичные операторы. Полевые операторы. Модель Хаббарда	15
2.1 Модель Хаббарда	18
2.2 Электронный газ в модели желе	20
3 Электронный газ в модели желе. Эффективный гамильтониан. Предел высокой плотности. Первый порядок и несостоятельность более высоких порядков теории возмущений	23
3.1 Электронный газ в модели желе. Продолжение	23
3.1.1 Предел высокой плотности	24
3.1.2 Первый порядок теории возмущений	26
3.1.3 Несостоятельность второго и более высоких порядков теории возмущений	28
3.2 Функции Грина действительного времени	30
3.2.1 Представление Гейзенберга	30
3.2.2 Квантовомеханический вид распределения Гиббса	31
4 Функции Грина*. Представление Гейзенберга. Квантово-механический вид распределения Гиббса. Спин-независимый гамильтониан, трансляционно-инвариантный потенциал	33
4.1 Функции Грина действительного времени. Продолжение	33

4.1.1	Определение функций Грина	34
4.1.2	Физический смысл функций Грина	36
4.1.3	Спин-независимый гамильтониан. Трансляционно-инвариантный потенциал	36
4.1.4	Функция Грина идеальной системы	38
5	Теория линейного отклика. Уравнение движения для причинной функции Грина	40
5.1	Функции Грина действительного времени. Продолжение	40
5.1.1	Теория линейного отклика	40
5.1.2	Уравнение движения для запаздывающей функции Грина	43
5.1.3	Квантовая точка с одним уровнем	45
6	Квантовая точка с одним уровнем. Функции Грина мнимого времени	47
6.1	Функции Грина действительного времени. Продолжение	47
6.1.1	Квантовая точка с одним уровнем	47
6.2	Функция Грина мнимого времени	49
6.2.1	Периодичность	50
6.2.2	Связь с термодинамическими характеристиками	52
7	Связь функций Грина мнимого времени с термодинамическими характеристиками и с функциями Грина вещественного времени	53
7.1	Функция Грина мнимого времени	53
7.1.1	Связь с термодинамическими характеристиками	53
7.1.2	Связь функций Грина мнимого времени с функциями Грина вещественного времени	56
8	Системы с взаимодействием, U-оператор	58
8.1	Функция Грина мнимого времени	58
8.1.1	Пример: невзаимодействующая система	58
8.2	Системы с взаимодействием	59
8.2.1	U-оператор	59
8.2.2	Функция Грина через U-оператор	61
8.2.3	Среднее по невзаимодействующей системе	62
9	Функция Грина в первом порядке теории возмущений	64

9.1	Системы с взаимодействием	64
9.2	Функция Грина в первом порядке теории возмущений	64
9.2.1	Сокращение несвязных диаграмм	69
9.2.2	Топологически различные диаграммы	71
10	Правило Фейнмана и примеры его применения	74
10.1	Функция Грина в первом порядке теории возмущений. Продолжение .	74
10.1.1	Правило Фейнмана	74
10.1.2	Примеры применения правил Фейнмана	78
10.1.3	Собственная энергия	80
11	Электронный газ: первый и второй порядок теории возмущений	83
11.1	Функция Грина в первом порядке теории возмущений. Продолжение .	83
11.2	Электронный газ	87
11.2.1	Первый порядок теории возмущений	87
11.2.2	Второй порядок теории возмущений	90
11.2.3	Степени расходимости диаграмм	91
12	Экранировка кулоновского взаимодействия. Функция корреляции плотности	94
12.1	Электронный газ. Продолжение	94
12.1.1	Суммирование диаграмм R	95
12.1.2	Экранировка кулоновского взаимодействия	98
12.1.3	Функция корреляции плотности	99
13	Плазмоны. Электроны в периодическом потенциале	102
13.1	Электронный газ. Продолжение	102
13.1.1	Функция корреляции плотности	102
13.1.2	Пример: плазмоны	103
13.2	Описание кристаллов	107
13.2.1	Электроны в периодическом потенциале	107
14	Электрон-фононное взаимодействие. Функция Грина свободного фонона	111
14.1	Описание кристаллов. Продолжение	111
14.1.1	Фононы	111

14.1.2	Электрон-фононное взаимодействие. Приближение жестких ионов	114
14.1.3	Функция Грина свободного фонона	115
14.1.4	Правило Фейнмана для электрон-фононного взаимодействия . .	117
14.1.5	Собственная энергия электрона	119
15	Собственная энергия электрона (продолжение). Сверхпроводники: Общие свойства. Эффективное электрон-электронное взаимодей- ствие. Куперовские пары. BCS-теория	121
15.1	Описание кристаллов. Продолжение	121
15.1.1	Собственная энергия электрона. Продолжение	121
15.2	Сверхпроводники	122
15.3	Общие свойства	123
15.3.1	Эффективное электрон-электронное взаимодействие	124
15.3.2	Куперовские пары	127
15.3.3	BCS теория	130
16	Подход функций Грина. Диаграммный подход. Определение тем- пературы перехода	133
16.1	Сверхпроводники. Продолжение	133
16.1.1	Подход функций Грина	133
16.1.2	Диаграммный подход	133
16.1.3	Определение температуры перехода	137

Введение. Предмет курса. Одночастичные состояния. Представление вторичного квантования.

Введение

Предмет курса

Ключевым аспектом в статистической физике является наличие взаимодействия многих частиц друг с другом. Это определяет сущность статистической системы: ее отличительные свойства и явления, характерные для каждой конкретной системы. Наличие немалого взаимодействия мешает аналитическому расчету свойств статистической системы: не работает теория возмущений, а также методы усреднения (метод среднего поля). Нужно развивать подход, который может помочь учесть взаимодействия и довести ответы до конкретных выражений. Было предложено использовать технику, переходящую из другого раздела физики (квантовая теория поля – диаграммы Фейнмана. Ричард Фейнман разработал способ универсального описания взаимодействия элементарных частиц друг с другом с учетом кратности взаимодействий. В середине 50х годов казалось, что этот подход можно адаптировать для статистических систем (статсумма, вероятности реализации микросостояний).

Для применения подхода к статистическим системам нужно использовать не частицы, а квазичастицы. Квазичастицы возникают в том случае, когда внешняя частица, которая вторгается в систему, взаимодействует с частицами системы и возбуждает некоторые явления (колебания, обмен энергией или импульсом).

Рассмотрим электронный газ, в котором расположены электроны, взаимодействующие по Кулону. Наложим положительный однородный фон, компенсирующий отрицательный заряд, созданный электронами. Это модель электрона в металле. Если рассмотреть отдельный электрон, то можно увидеть, что он расталкивает электроны вокруг – в среднем концентрация соседних электронов понижается, происходит разряжение. Возникает область локального положительного заряда. Отрицательная оболочка оказывается невидимой. Наблюдаем некоторую положительную область, которая окружает отрицательный электрон. В терминах квантовой физики: наблюдаем центральный электрон, дырки и электроны, которые были отодвинуты от центрального. Если электрон движется, то он расталкивает электроны, находящиеся на новых позициях, концентрация будет выравниваться. Положительная область дви-

жется вместе с электроном. Все вместе будем называть квазичастицей.

Если рассматривать не одну квазичастицу, а две, то можно заметить, что отрицательные центральные заряды экранированы положительной областью локального понижения плотности электронов. Отрицательный заряд по плотности оказывается меньше. Две квазичастицы будут взаимодействовать менее интенсивно, чем в случае неэкранированных электронов. Можно добиться ситуации, когда квазичастицы не взаимодействуют вовсе. Для них можно применить разложение в ряд теории возмущений. Такие концепции работают во многих других системах, например, в нуклонах.

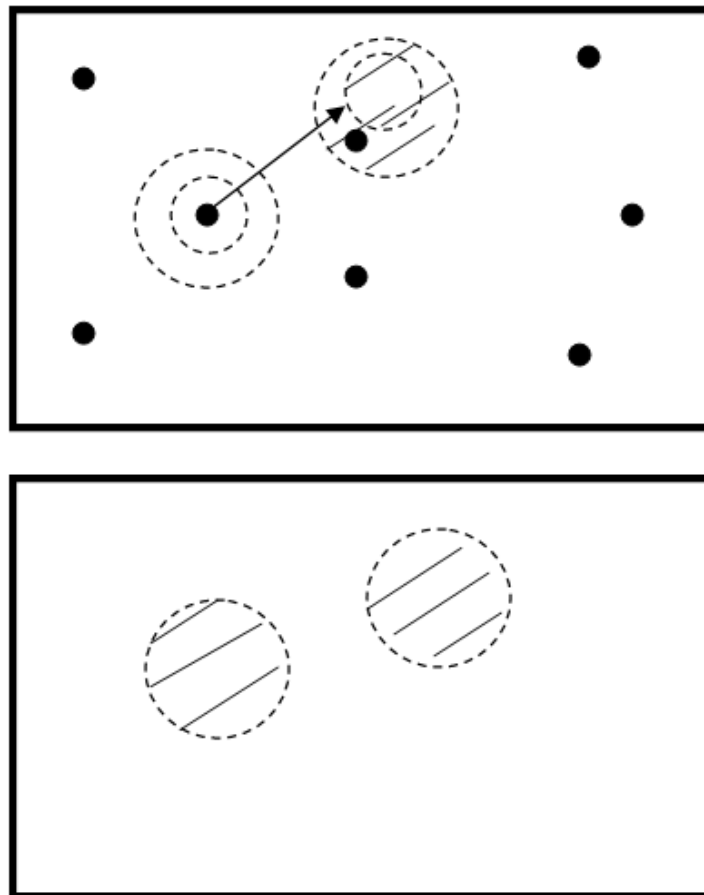


Рис. 1.1. Модель электрона в металле

Еще один пример – тяжелое атомное ядро (рис. 2.2). Нуклон взаимодействует только со своим окружением. Если ядро достаточно большое (много частиц, большой порядковый номер), то квазинуклоны могут не взаимодействовать друг с другом.

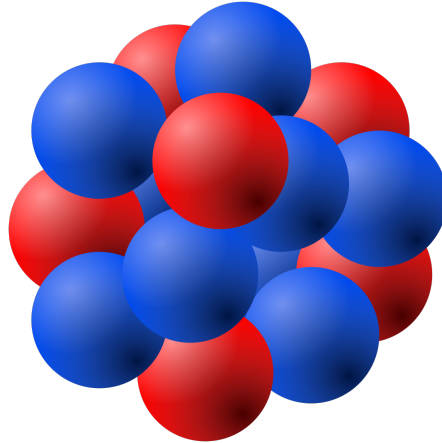


Рис. 1.2. Нуклон

Также важны коллективные возбуждения в статистических системах:

- фононы – кванты акустических колебаний;
- плазмоны – плазма с зарядом, колеблющимся синусоидально вдоль некоторого направления;
- магноны.

Рассмотрим математическое описание системы. Для этого полезен подход, основанный на функции Грина. Функции Грина содержат информацию о системе достаточно, чтобы восстановить ее свойства.

Функции Грина удобны по ряду причин:

- напрямую соотносятся с важными физическими свойствами;
- разработан систематический способ их вычисления – диаграммная техника;
- наблюдаемые могут быть выражены через функции Грина (используется в компьютерных вычислениях).

Рассмотрим пример – электронный газ (рис. 1.3). В электронный газ влетает внешний электрон. Пружинкой отмечено условное взаимодействие. Образуется дырка – разряжение электронной плотности. Произошло два взаимодействия, и ситуация вернулась к исходной.

Первая диаграмма описывает жизнь не элементарной частицы, а статсистемы. Если построить определенного вида функцию, то можно в соответствие каждому элементу поставить конституцию. Если таких процессов будет много, то электрон покрывается «шубой» из дырок и отодвинутых электронов и реализуется концепция, показанная выше.

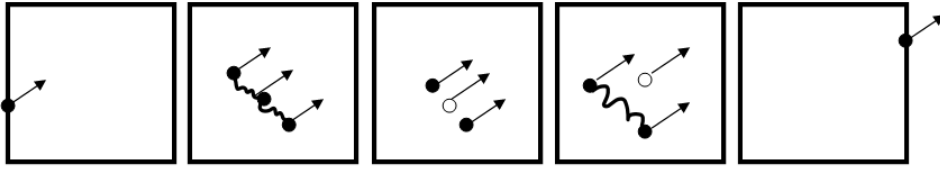


Рис. 1.3. Пример. Электронный газ

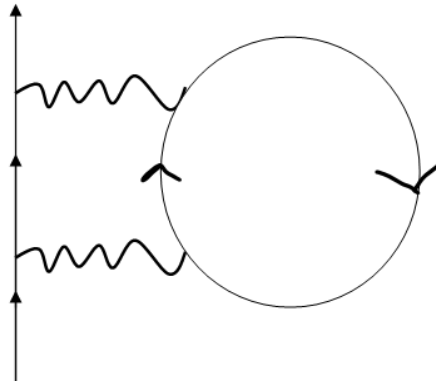


Рис. 1.4. Первая диаграмма

Замечание. Если накладывается внешнее поле, а в системе происходят изменения, электроны начинают чувствовать их, тогда можно использовать функцию Грина для расчета отклика системы на внешнее поле.

Одночастичное состояние

Запишем Гамильтониан системы в виде:

$$H = \sum_{i=1}^N h_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N v_{ij} - 2pH \sum_{i=1}^N S_2^{(i)} \quad (1.1)$$

$$h_i = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + v_i \quad (1.2)$$

Рассмотрим одночастичное состояние невзаимодействующих частиц.

$$v_i = v_{ij} = 0 \quad (1.3)$$

Для каждой отдельной частицы вектор состояния будет зависеть только от параметров частицы.

$$|k\rangle = |\vec{k}\rangle |\sigma\rangle \quad (1.4)$$

Для краткости будем понимать эту запись как прямое произведение.

Может быть только два состояния:

$$|\sigma\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \quad (1.5)$$

Каждый из этих состояний является собственным состоянием для оператора проекции спина:

$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \quad (1.6)$$

Соотношение ортогональности и полноты:

$$\langle \sigma | \sigma' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.7)$$

$$\sum_{\sigma} |\sigma\rangle \langle \sigma| = 1 \quad (1.8)$$

Очевидно, что вектора ортогональны для разных проекций.

Будем использовать в качестве системы коробку с размером L . Будем использовать периодические граничные условия. Результаты расчетов не зависят от граничных условий для равновесной системы.

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}}(x, y, z) = \varphi_{\vec{k}}(x + L, y, z) = \varphi_{\vec{k}}(x, y + L, z) = \varphi_{\vec{k}}(x, y, z + L) \quad (1.9)$$

Решение стационарного уравнения Шредингера – плоская волна.

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = N e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (1.10)$$

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (1.11)$$

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (1.12)$$

Значения дискретные, поэтому используется дискретный символ Кронекера

$$\langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (1.13)$$

$$\sum_{\vec{k}} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}| = 1 \quad (1.14)$$

Доказать, что

$$\int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| d\vec{r} = 1 \quad (1.15)$$

Отсюда можно, используя формулы выше, получить соотношение полноты для волновой функции:

$$\sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \varphi_{\vec{k}}^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.16)$$

Вычислим константу нормировки.

$$\langle \vec{k}\sigma | \vec{k}\sigma' \rangle = \int d\vec{r} N^2 e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} \langle \sigma | \sigma' \rangle \quad (1.17)$$

Используем соотношение ортогональности:

$$\langle \sigma | \sigma' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.18)$$

Тогда:

$$\langle \vec{k}\sigma | \vec{k}\sigma' \rangle = \int d\vec{r} N^2 e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} \cdot \delta_{\sigma\sigma'} = N^2 \delta_{\vec{k}\vec{k}'} V \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.19)$$

Представление вторичного квантования

Если задать вакуумное состояние, то при помощи операторов рождения и уничтожения:

$$a_k^+ |0\rangle = |k\rangle \quad (1.20)$$

$$(\vec{k}, \sigma) = k \quad (1.21)$$

$$a_p^+ a_q^+ |k_1 \dots k_N\rangle = |pqk_1 \dots k_N\rangle \quad (1.22)$$

Операторы рождения антикоммутируют:

$$a_p^+ a_q^+ + a_q^+ a_p^+ = [a_p^+, a_q^+]_+ = 0 \quad (1.23)$$

Для уничтожения частиц:

$$a_q |qk_1 \dots k_N\rangle = |k_1 \dots k_N\rangle \quad (1.24)$$

$$a_{k_1} |qk_1 \dots k_N\rangle = -|qk_2 \dots k_N\rangle \quad (1.25)$$

Некоторое определяющее соотношение, на котором базируется алгебра операторов рождения и уничтожения:

$$[a_k, a^+]_+ = \delta_{kq} \quad (1.26)$$

Эти операторы действуют в пространстве Фока.

Одночастичные операторы в представлении вторичного квантования

Рассмотрим систему с Гамильтонианом идеальной системы:

$$H_0 = \sum_i h_i = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + v_i \right) \quad (1.27)$$

$$H_0 = \sum_i h_i = \sum_{p,q} \sum_i |p \rangle_i \langle p| h_i |q \rangle_i \langle q| \quad (1.28)$$

Центральная часть $i \langle p| h_i |q \rangle_i$ не зависит от i .

$$H_0 = \sum_{p,q} \langle p| h |q \rangle \sum_i |p \rangle_i \langle q| = \sum_{p,q} \langle p| h |q \rangle R_{pq} \quad (1.29)$$

Рассмотрим реализацию вектора состояния.

$$|k_1 \dots k_N \rangle = N \sum_{\pi} (-1)^{\pi} |k_{\pi(1)} \rangle \dots |k_{\pi(N)} \rangle \quad (1.30)$$

Если $q \notin (k_1 \dots k_N)$, то

$$i \langle q | k_{\pi(i)} \rangle_i = 0 \quad (1.31)$$

Если $q \in (k_1 \dots k_N)$, то

$$|p \rangle_i \langle q | k_{\pi(i)} \rangle_i = |p \rangle_i \quad (1.32)$$

Считаем, что базис ортонормированный. Произошла замена состояния q в p . Других ситуаций быть не может. Таким образом:

$$R_{pq} = a_p^+ a_q \quad (1.33)$$

Тогда окончательно:

$$H_0 = \sum_{p,q} \langle p| h |q \rangle a_p^+ a_q \quad (1.34)$$

Рассмотрим пример расчета матричного элемента.

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (1.35)$$

$$\langle \vec{k} \sigma | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \vec{k}' \sigma' \rangle \quad (1.36)$$

$$\varphi_k(i) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_i \vec{r}} | \sigma \rangle_i \quad (1.37)$$

$$M \Theta = -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k})^2 \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.38)$$

Таким образом:

$$T = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}, \sigma}^+ a_{\vec{k}, \sigma} \quad (1.39)$$

Рассмотрим еще один пример.

$$\hat{V} = \sum_i v_i \quad (1.40)$$

$$\langle \vec{k}\sigma | v | \vec{k}'\sigma' \rangle = \frac{1}{(\sqrt{V})^2} \int e^{-i(\vec{k}-\vec{k}'\cdot\vec{r})v(\vec{r})d\vec{r}} \langle \sigma | \sigma \rangle = v_{\vec{k}-\vec{k}'} = \frac{1}{V} v_{\vec{k}-\vec{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.41)$$

Тогда:

$$\hat{V} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma} v_{\vec{k}-\vec{k}'} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}'\sigma} \quad (1.42)$$

В этом случае наблюдается рассеяние во внешнем поле. Направление поляризации электрона неизменно. В результате:

$$\hat{V} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \sigma} v_{\vec{q}} a_{\vec{k}', \vec{q}, \sigma}^+ a_{\vec{k}', \sigma} \quad (1.43)$$

Двухчастичные операторы в представлении вторичного квантования

Рассмотрим взаимодействие. Запишем соответствующий гамильтониан:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{p, q} \sum_{i \neq j} |p \rangle \langle i | |q \rangle \langle j | i j \langle pq | v_{ij} | mn \rangle | i \rangle \langle m | | j \rangle \langle n | = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{pq} \sum_{mn} \langle pq | v | mn \rangle \sum_{i \neq j} |p \rangle \langle i | |q \rangle \langle j | i \langle m | | j \rangle \langle n | \end{aligned} \quad (1.44)$$

Пусть $R_{pqmn} = \sum_{i \neq j} |p \rangle \langle i | |q \rangle \langle j | i \langle m | | j \rangle \langle n |$.

$$\begin{aligned} R_{pqmn} &= \sum_i |p \rangle \langle i | i \langle m | \sum_{j \neq i} |q \rangle \langle j | j \langle n | = \sum_i |p \rangle \langle i | i \langle m | \left(\sum_j |q \rangle \langle j | j \langle n | - |q \rangle \langle i | i \langle n | \right) = \\ &= R_{pm} R_{qn} - \delta_{mq} R_{pn} = a_p^+ a_m a_q^+ a_n - \delta_{mq} a_p^+ a_n = a_p^+ (-a^+ + q a_m + \delta_{mq}) a_n - \delta_{mq} a_p^+ a_n = \\ &= -a_p^+ a_q^+ a_m a_n = a_p^+ a_q^+ a_n a_m \end{aligned} \quad (1.45)$$

Таким образом:

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum + pq \sum + nm \langle pq | v | mn \rangle a_p^+ a_q^+ a_n a_m \quad (1.46)$$

Одночастичные операторы в представлении вторичного квантования. Двучастичные операторы. Полевые операторы. Модель Хаббарда

Статистические системы требуют отдельных приемов при их взаимодействии, поэтому стоит разрабатывать диаграммную технику. Представление чисел заполнения наиболее естественным образом подходит для создания и рассмотрения функции Грина.

Для одночастичных операторов:

$$H_0 = \sum_{p,q} \langle p|h|q \rangle a^+ a_q \quad (2.1)$$

Для потенциальной энергии получено: неизменно. В результате:

$$\hat{V} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k},\vec{q},\sigma} v_{\vec{q}} a_{\vec{k},\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k},\sigma} \quad (2.2)$$

где σ – спин.

Явно записываем:

$$v_{\vec{q}} = \int e^{-i\vec{q}\vec{r}} v(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.3)$$

Обратная формула:

$$v(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \cdot v_{\vec{q}}, \quad (2.4)$$

где V – объем. Интегрирование по объему:

$$\int_V e^{-i(\vec{k}-\vec{q})\vec{r}} d\vec{r} = V \delta_{\vec{k}\vec{q}} \quad (2.5)$$

Для двухчастичных:

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} \sum_{pq} \sum_{mn} \langle pq|v|mn \rangle a_p^+ a_q^+ a_n a_m \quad (2.6)$$

Запишем плотность числа частиц:

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.7)$$

Те координаты, которые входят в область пространства интегрирования, дают единичный вклад. Сумма пересчитает те частицы, которые попали в рассматриваемую

область пространства. Условно сумму можно назвать плотностью числа частиц, поскольку область пространства произвольна. Ищем вид гамильтониана, который относится к одной частице.

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_i \delta_i \quad (2.8)$$

В качестве базиса выбираются плоские волны.

$$\langle \vec{k}\sigma | \delta | \vec{k}'\sigma' \rangle = \frac{1}{V} \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') e^{-i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}'} \cdot d\vec{r}' \langle \sigma | \sigma' \rangle = \frac{1}{V} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.9)$$

Матричный элемент стоит подставить в двойную сумму.

$$\hat{n} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \sigma} e^{\frac{1}{V} - i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}'\sigma} \quad (2.10)$$

Сделаем замену переменных. Обозначим: $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$:

$$\hat{n} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \sum_{\vec{k}'\sigma} a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}'\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \cdot n_{\vec{q}} \quad (2.11)$$

Так можно выразить оператор плотности числа частиц.

Рассмотрим менее общий вид оператора взаимодействия, а именно трансляционно-инвариантный потенциал.

$$V_1 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1\sigma_1} \sum_{\vec{k}_2\sigma_2} \sum_{\vec{k}_3\sigma_3} \sum_{\vec{k}_4\sigma_4} \langle \vec{k}_1\sigma_1 \vec{k}_2\sigma_2 | v | \vec{k}_3\sigma_3 \vec{k}_4\sigma_4 \rangle a_{\vec{k}_1\sigma_1}^+ a_{\vec{k}_2\sigma_2}^+ a_{\vec{k}_3\sigma_3} a_{\vec{k}_4\sigma_4} \quad (2.12)$$

Примеры – закон Кулона, закон всемирного тяготения.

$$M\Theta = \frac{1}{V} \int d\vec{r}_1 \frac{1}{V} \int d\vec{r}_2 e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)\vec{r}_1 - i(\vec{k}_2 - \vec{k}_4)\vec{r}_2} \cdot v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (2.13)$$

От координатного представления перейдем к импульсному.

$$\begin{aligned} & \langle \sigma_1 | \sigma_3 \rangle \langle \sigma_2 | \sigma_4 \rangle = \\ & = \frac{1}{V} \int d\vec{r}_1 \frac{1}{V} \int d\vec{r}_2 e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)\vec{r}_1 - i(\vec{k}_2 - \vec{k}_4)\vec{r}_2} \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \cdot v_{\vec{q}} \cdot \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} \end{aligned} \quad (2.14)$$

Объединим все необходимые переменные интегрирования:

$$\langle \sigma_1 | \sigma_3 \rangle \langle \sigma_2 | \sigma_4 \rangle = \frac{1}{V^3} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} \int d\vec{r}_1 e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_3 - \vec{q})\vec{r}_1} \int d\vec{r}_2 e^{-i(\vec{k}_2 - \vec{k}_4 + \vec{q})\vec{r}_2} \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} =$$

$$= \frac{V^2}{V^3} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} \delta_{\vec{q}, \vec{k}_1 - \vec{k}_3} \delta_{\vec{q}, \vec{k}_4 - \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} \delta_{\vec{q}, \vec{k}_1 - \vec{k}_3} \delta_{\vec{q}, \vec{k}_4 - \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} \quad (2.15)$$

Подставляем полученное выражение в V_1 :

$$\hat{V}_1 = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{k}'\sigma'} v_{\vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^+ a_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}'\sigma'} \quad (2.16)$$

Здесь была сделана замена:

$$\begin{cases} k_3 \longrightarrow k \\ k_4 \longrightarrow k' \end{cases} \quad (2.17)$$

Проанализируем выражение. Новые частицы наблюдаем как выходящие. Определим, какие состояния меняются.

$$\frac{1}{2} \sum < 12 | v | 34 > a_1^+ a_2^+ a_4 a_3 \quad (2.18)$$

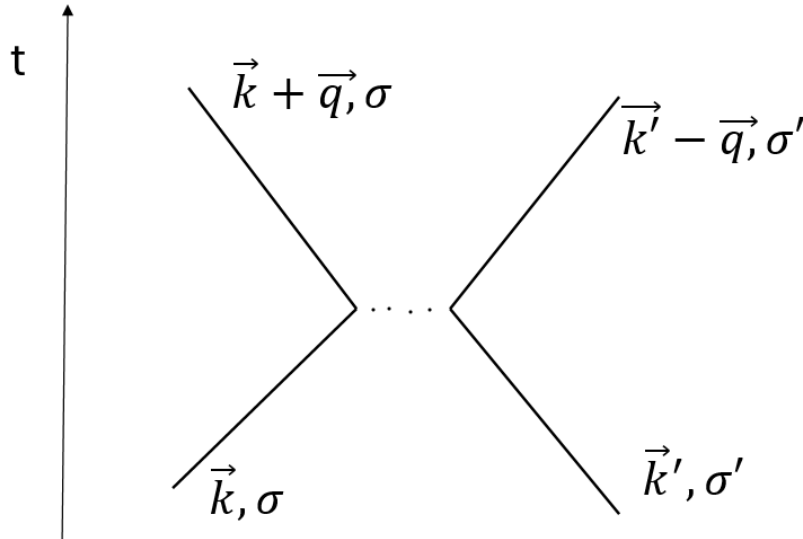


Рис. 2.1. Диаграмма к примеру 2

Импульс перетекает от одной ветке к другой. Используя представление вторичного квантования можно выписывать комбинацию слагаемых с графической интерпретацией.

Рассматриваем потенциал

$$v_{ij} = \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} e^{-\mu |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.19)$$

$\mu > 0$ – параметр регуляризации. В качестве домашнего задания предлагается посчитать Фурье-образ.

Модель Хаббарда

Представление вторичного квантования привело к некоторой комбинации. Однако такие гамильтонианы используются в реальной научной работе. Рассмотрим модель Хаббарда $(\dots) : |ni\sigma\rangle$ (2.20) n – индекс энергетической зоны, i – индекс атома, σ – проекция спина.

Если записать функции в координатном представлении, то

$$\varphi(ni\sigma)(\vec{r}) = \langle r | ni\sigma \rangle \quad (2.21)$$

Свойства:

1. Центр находится в координате нахождения i -го атома, то есть в точке \vec{R}_i :

$$\varphi_{ni\sigma}(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (2.22)$$

2. Локализация. Амплитуда существенна только в окрестности одного атома.

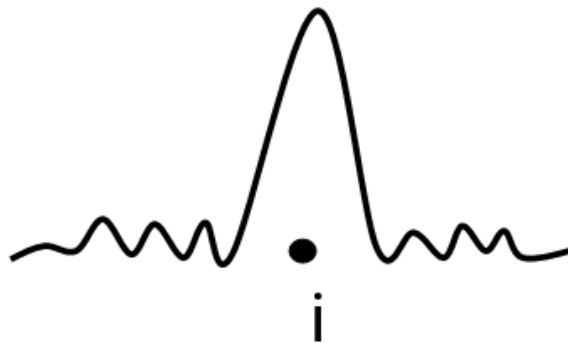


Рис. 2.2. Локализация

3. Функции образуют ортонормированный базис.

Рассмотрим материал с одной энергетической зоной, то есть случай, когда $n = 1$.

$$c_{i\sigma}^+ |0\rangle = |i\sigma\rangle \quad (2.23)$$

Можно повторить выкладки. Запишем гамильтониан:

$$H = \sum_{i\sigma} \sum_{j\sigma'} \langle i\sigma | h | j\sigma' \rangle c_{i\sigma}^+$$

$$+c_{j\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma_1} \sum_{j\sigma_2} \sum_{i'\sigma'_1} \sum_{j'\sigma'_2} \langle i\sigma_1 j\sigma_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | i'\sigma'_1 j'\sigma'_2 \rangle \cdot c_{i\sigma_1}^+ c_{j\sigma_2}^+ c_{j'\sigma'_2} c_{i'\sigma'_1} \quad (2.24)$$

Получили общий вид. Введем упрощение. Обозначим матричный элемент следующим образом:

$$\langle i\sigma | h | j\sigma' \rangle = \langle i | h | j \rangle \langle \sigma | \sigma' \rangle = t_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.25)$$

Часть, отвечающая за взаимодействие:

$$\langle i\sigma_1 j\sigma_2 | \frac{e^2}{r_{12}} | i'\sigma'_1 j'\sigma'_2 \rangle = U_{ijj'j'} \delta_{\sigma_1\sigma'_1} \delta_{\sigma_2\sigma'_2} \quad (2.26)$$

$U_{ijj'j'}$ – интенсивность взаимодействия двух электронов. Можно наложить требование на свойство системы. Например, будем рассматривать только взаимодействие соседних атомов, то есть перескоки будут только между соседними атомами. Рассмотрим лишь два электрона на одном узле. Тогда получаем гамильтониан в виде:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma_1\sigma_2} U c_{i\sigma_1}^+ c_{i\sigma_2}^+ c_{i\sigma_2} c_{i\sigma_1} = \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma_1\sigma_2:\sigma_1 \neq \sigma_2} n_{i\sigma_1} n_{i\sigma_2} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Данный гамильтониан был впервые опубликован в 1963 году, с тех пор активно исследовался как аналитически, так и численно. Модель активно используется в физике конденсированного состояния: может описывать графен и другие материалы с похожей структурой.

Особенность модели: если в одном узле два электрона, то гамильтониан скачком возрастает на U , поэтому в среднем модель старается использовать по одному электрону – модель с половинным заполнением.

Рассмотрим теперь полевые операторы. Все формулы были в импульсном представлении, интересно посмотреть, что происходит в той или иной области пространства. Возьмем произвольный ортонормированный базис: $|n\rangle$.

$$|\vec{r}\sigma\rangle = \sum_{n,\lambda} |n\lambda\rangle \langle n\lambda | \vec{r}\sigma \rangle = \sum_{n,\lambda} |n\lambda\rangle \varphi_n^*(\vec{r}) \langle \lambda | \sigma \rangle = \sum_n \varphi_n^*(\vec{r}) a_{n\sigma}^+ |0\rangle \quad (2.28)$$

λ – спин.

Введем определение. Из вакуума напрямую можно создать $|\vec{r}\sigma\rangle$.

$$\Psi_{\sigma}^+(\vec{r}) |0\rangle = |\vec{r}\sigma\rangle \quad (2.29)$$

Такой оператор назовем одним из полевых операторов. Установим явный вид:

$$\Psi_0(\vec{r}) = \sum_n \varphi_n(\vec{r}) a_{n\sigma} \quad (2.30)$$

$$\Psi_\sigma^+(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}\sigma}^+ \quad (2.31)$$

k различает различные состояния плоских волн, дискретно.

Исследуем некоторые свойства. Антиккоммутационные соотношения записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} [\Psi_\sigma^+(\vec{r}), \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}')]_+ &= \sum_{n,n'} \varphi_n(\vec{r}) \varphi_{n'}^*(\vec{r}') [a_{n\sigma}, a_{n'\sigma'}^+] = \\ &= \sum_{n,n'} \varphi_n(\vec{r}) \varphi_{n'}^* \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} = \sum_n \langle \vec{r}|n \rangle \langle n|\vec{r}' \rangle \delta_{\sigma\sigma'} = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Нашли антикоммутационное соотношение, похожее на соотношение, которое характеризовало операторы рождения и уничтожения.

$$[\Psi_\sigma^+(\vec{r}), \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}')]_+ = 0 \quad (2.33)$$

Выразим операторы через Ψ :

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{n,\sigma} \sum_{n',\sigma'} \langle n\sigma|h|n'\sigma' \rangle a_{n\sigma}^+ a_{n'\sigma'} = \sum_{n,\sigma} \sum_{n',\sigma'} \int d\vec{r} \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) \langle \sigma|h|\sigma' \rangle a_{n\sigma}^+ a_{n'\sigma'} = \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \int d\vec{r} \Psi_\sigma^+(\vec{r}) h_{\sigma\sigma'} \Psi_{\sigma'}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Удобно работать именно в матричных обозначениях.

Пример. Для плотности числа частиц:

$$n(\vec{r}) = \sum_\sigma \Psi_\sigma^+(\vec{r}) \Psi_\sigma(\vec{r}) \quad (2.35)$$

Получили все необходимые математические конструкции.

Электронный газ в модели желе

При рассмотрении электронного газа в металле удобно разделить систему на две подсистемы. Электроны взаимодействуют друг с другом и положительным фоном.

Фон считается неподвижным и неизменным, он представляет собой лишь компенсацию заряда. В целом система будет характеризоваться гамильтонианом следующего вида:

$$H = H_e + H_b + H_{eb} \quad (2.36)$$

H_b – воздействие ионов на другие.

Взаимодействие электронов:

$$H_e = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{k}'\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2 + \mu^2} a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}-\vec{q},\sigma'}^+ a_{\vec{k}'\sigma'} a_{\vec{k}\sigma} \quad (2.37)$$

При нулевом значении q нельзя будет взять предел, поэтому нельзя производить вычисления без слагаемых H_b , H_{eb} . Попробуем расписать вклад второго слагаемого. Для этого нужно рассмотреть плотность электрического заряда

$$H_b = \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} e^{-\mu|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' \quad (2.38)$$

Это выражение описывает энергию, связанную с наличием распределенной области положительного заряда. Воспользуемся тем, что для однородного фона:

$$\rho = \frac{Ne}{V}, \quad (2.39)$$

то есть суммарный заряд, деленный на объем. Тогда можно записать:

$$H_b = \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{N^2 e^2}{2V^2} \int \frac{e^{-\mu|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}d\vec{r}' \quad (2.40)$$

Пусть

$$x = |\vec{r}-\vec{r}'| \quad (2.41)$$

тогда:

$$H_b = \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{N^2 e^2}{2V^2} \int \frac{e^{-\mu x}}{x} dx \int d\vec{r}' = \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{N^2 e^2}{2V} 4\pi \int_0^\infty dx x e^{-\mu x} \quad (2.42)$$

Необходимо учесть предельную статистическую процедуру:

$$\begin{cases} N \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty \\ \frac{N}{V} = \text{fix} \end{cases} \quad (2.43)$$

Теперь можно записать ответ:

$$H_b = \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{N^2 e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2}, V \rightarrow \infty \quad (2.44)$$

Вклад, опирающийся на взаимодействие электронов с фоном:

$$\begin{aligned}
 H_{eb} &= \lim_{\mu \rightarrow +0} \sum_{i=1}^N \int \frac{(-e)}{\rho}(\vec{r}) |\vec{r} - \vec{r}_i| e^{-\mu(|\vec{r} - \vec{r}_i|)} d\vec{r} = - \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{Ne^2}{V} \sum_i \int \frac{e^{-\mu x}}{x} d\vec{x} = \\
 &= - \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{Ne^2}{V} \sum_i \frac{4\pi}{\mu^2} = - \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{4\pi N^2 e^2}{V\mu^2}, V \rightarrow \infty
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

Сложим гамильтониан фона и гамильтониан взаимодействия электронов с фоном:

$$H_b + H_{eb} = - \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{2\pi N^2 e^2}{V\mu^2} \tag{2.46}$$

Лишнее N остается в числителе. На этом этапе видно, что выражение расходится.

По этой причине результат нефизичен.

Электронный газ в модели желе. Эффективный гамильтониан. Предел высокой плотности. Первый порядок и несостоятельность более высоких порядков теории возмущений

Электронный газ в модели желе. Продолжение

Рассмотрели электронный газ в модели желе, где электроны взаимодействуют друг с другом и фоном. Записали общий гамильтониан:

$$H = H_e + H_b + H_{eb} \quad (3.1)$$

H_b – воздействие ионов на другие. Оказалось, что сумма не подлжит предельному переходу:

$$H_b + H_{eb} = - \lim_{\mu \rightarrow 0+} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{2\pi N^2 e^2}{V \mu^2} \quad (3.2)$$

Предсказания должны быть выполнены для больших систем.

$$\frac{N}{V} = \text{fix} \quad (3.3)$$

Видна расходимость. Непонятно, как реализовать вклад в энергию за счет наличия фона, гамильтониан становится бесконечным. Надежда на то, что первое слагаемое компенсирует отрицательный вклад. Взаимодействие электронов друг с другом:

$$H_e = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + \lim_{\mu \rightarrow 0+} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}\vec{k}'\sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2 + \mu^2} a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^+ a_{\vec{k}'\sigma'} a_{\vec{k}\sigma} \quad (3.4)$$

Интересует именно потенциальная часть для сокращения расходимости. Проблема возникает, если \vec{q} уменьшается (промежутки между уровнями сокращаются, тогда при стремлении μ к нулю получается деление на 0.

Поработаем с операторной структурой:

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}^+ a_{\vec{k}'\sigma'} a_{\vec{k}\sigma} &= -a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}'}^+ a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'} = -a_{\vec{k}}^+ (-a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}^+ + \delta_{\vec{k}\vec{k}'}) a_{\vec{k}'} = \\ &= a_{\vec{k}}' a_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}^+ a_{\vec{k}'} - \delta_{\vec{k}'\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}'} = N_{\vec{k}} N_{\vec{k}'} - \delta_{\vec{k}\vec{k}'} N_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Использовали антикоммутиационное соотношение. $N_{\vec{k}}$ – оператор числа частиц.

Вспомним про суммирование. Путем суммирования \vec{k}, \vec{k}' получаем:

$$\sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (N_{\vec{k}} N_{\vec{k}'} - \delta_{\vec{k}\vec{k}'} N_{\vec{k}}) = N^2 - N \quad (3.6)$$

$$N = \sum_k N_k \quad (3.7)$$

На данный момент это операторы. Работаем в базисе собственных значений гамильтониана, поэтому, поскольку есть коммутационное соотношение

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0 \quad (3.8)$$

Тогда можно выбрать собственный базис из собственных векторов. Далее можем воспринимать эти операторы как числа. Формулы приобретают смысл собственных значений гамильтониана. Используем это.

$$V_1|_{q=0} = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{2\pi N^2 e^2}{V\mu^2} (N^2 - N) \quad (3.9)$$

Вспомним результат для слагаемых с фоном.

$$H_b + H_{eb} = - \lim_{\mu \rightarrow +0} \frac{2\pi N^2 e^2}{V\mu^2} \quad (3.10)$$

Следовательно:

$$V_1|_{q=0} + H_b + H_{eb} = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{-2\pi e^2 N}{V\mu^2} \quad (3.11)$$

Остается взаимодействие электронов с электронами, где q ненулевое. Расходимость в энергии взаимодействия электронов друг с другом уничтожается благодаря наличию фона. Все, что остается, выполняет роль эффективного гамильтониана нашей модели. Запишем его:

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}, |\vec{q}| \neq 0} \sum_{\vec{k}, \sigma', \sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^+ a_{\vec{k}'-\vec{q}', \sigma'}^+ a_{\vec{k}'\sigma'} a_{\vec{k}\sigma} \quad (3.12)$$

Предел высокой плотности

Необходимо обсчитывать такую ситуацию, когда поправка меньше основного вклада. Нужно установить такой режим, когда поправка является возмущением. Волновые вектора принимают вид:

$$k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha, n_\alpha = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.13)$$

При увеличении L происходит уменьшение k_α . Обратная ситуация – пусть L уменьшается, то есть наращивается плотность. Кинетическая энергия:

$$T \sim k^2 \approx \frac{1}{L^2} \quad (3.14)$$

Потенциальная энергия:

$$V_1|_{q \neq 0} \sim \frac{1}{L^3} \left(\frac{1}{L} \right)^{-2} = \frac{1}{L} \quad (3.15)$$

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar \quad (3.16)$$

Кинетическая энергия растет пропорционально Δp . Из принципа неопределенности следует, что при уплотнении системы кинетическая энергия возрастает сильнее, чем потенциальная энергия. С некоторого момента можно считать потенциальную энергию отталкивания поправкой к кинетической энергии свободных электронов.

Видно, что **предел высокой плотности** – предел, в котором можем гамильтониан взаимодействия считать гамильтонианом возмущения. Для него можем применять формулы из квантовой теории.

Основное состояние – это невзаимодействующая система, будем обозначать как $|F\rangle$. Гамильтониан никак не меняется от спина, поэтому каждое состояние вырождено дважды. До значения k_F – шар Ферми. Ниже – все состояния заняты, выше – все состояния свободны.

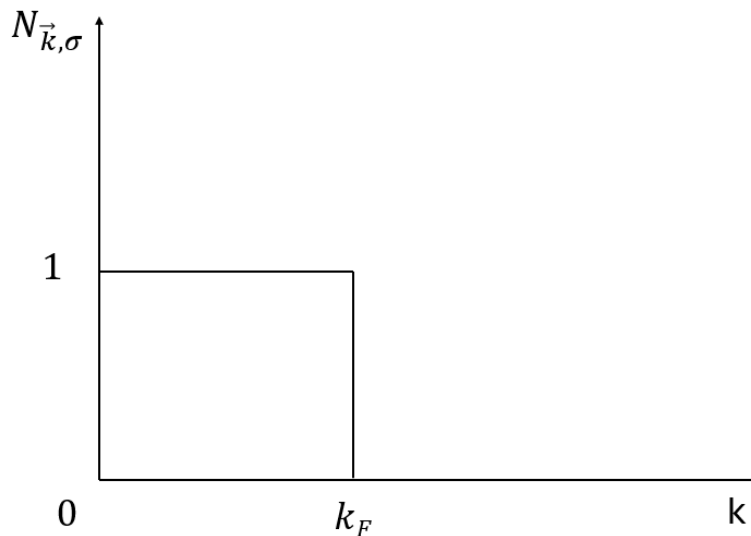


Рис. 3.1. Ступенька Ферми

Рассмотрим удельную энергию:

$$\frac{E_0}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{2}{N} \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{1}{N} \frac{V \hbar^2}{10\pi^2 m} k_F^5 \quad (3.17)$$

От суммы к интегрированию перешли по формуле Тейлора-Маклорена.

Энергия Ферми:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (3.18)$$

Используя переобозначение получаем:

$$\frac{E_0}{N} = \frac{1}{N} \frac{V \hbar^2}{10\pi^2 m} k_F^5 = \frac{3}{5} \varepsilon_F \quad (3.19)$$

Количество частиц:

$$N = \sum_{\vec{k}\sigma} 1 \quad (3.20)$$

Отсюда:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \quad (3.21)$$

К удельной энергии будем высчитывать поправки за счет отталкивания электронов друг с другом. При этом должен быть перенос энергии или импульса.

Первый порядок теории возмущений

Посчитаем первую поправку к энергии основного состояния. Возьмем гамильтониан и усредним его в невозмущенном состоянии:

$$E_1 = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}, |\vec{q}| \neq 0} \sum_{\vec{k}, \sigma, \sigma'} \frac{4\pi e^2}{q^2} \langle F | a_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^+ a_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma'}^+ a_{\vec{k}' \sigma'} a_{\vec{k} \sigma} | F \rangle \quad (3.22)$$

Нужно заменить частицы одним из следующих образов:

$$\begin{cases} \vec{k} + \vec{q} = \vec{k} \\ \vec{k}' - \vec{q} = \vec{k}' \end{cases} \quad (3.23)$$

$$\begin{cases} \vec{k} + \vec{q} = \vec{k}' \\ \vec{k}' - \vec{q} = \vec{k} \\ \sigma = \sigma' \end{cases} \quad (3.24)$$

Частицы должны остаться в невозмущенном состоянии, матричный элемент должен быть ненулевым. Во втором случае видно, что спин должен сохраняться. Решение первой системы:

$$q = 0 \quad (3.25)$$

Вкладов в сумму от первого варианта нет, значит будем рассматривать второй вариант.

$$\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}'\vec{k}+\vec{q}} \quad (3.26)$$

Тогда матричный элемент можно записать в виде:

$$M\Theta = \langle F | a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^+ | F \rangle \quad (3.27)$$

Переставим два оператора, получим оператор числа частиц:

$$M\Theta = - \langle F | a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} | F \rangle \quad (3.28)$$

Оператор числа частиц действует на $|F\rangle$ таким образом:

$$a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} |F\rangle = \theta(k_F - |\vec{k}|) |F\rangle \quad (3.29)$$

Здесь θ – функция Хевисайда $\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$. $M\Theta = -\theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \theta(k_F - |\vec{k}|)$ (3.30) Получили матричный элемент из физических соображений.

$$E_1 = -\frac{4\pi e^2}{V} \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right)^2 \int \frac{d\vec{q}}{q^2} \int d\vec{k} \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \theta(k_F - |\vec{k}|) = -4\pi c^2 \frac{V}{(2\pi)^6} \int \frac{d\vec{q}}{q^2} V_r(\vec{q}) \quad (3.31)$$

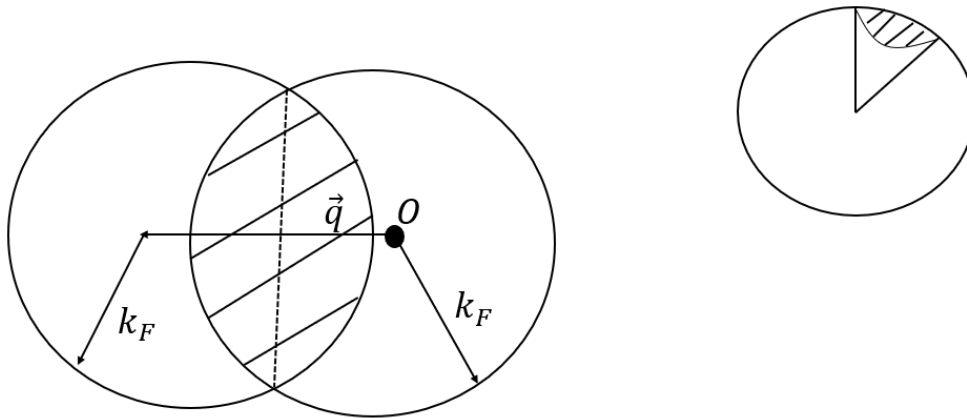


Рис. 3.2. Графическое описание

Неочевидно, что выражение по записи зависит не от модуля, а от значения q . Посмотрим, что может быть нарисовано графически. Каждая θ -комбинация – это шар, вне области которого получаются нулевые значения.

$$V_{\Gamma}(\vec{q}) = 2V_{\text{сегмент}} = 2 \frac{2}{3} (3r - h) \Big|_{r=k_F, h=k_f - 0.5q} = \frac{2\pi}{3} \left(k_f - \frac{q}{2}\right)^2 \left(2k_F + \frac{q}{2}\right) =$$

$$= \frac{4\pi k_F^3}{3} \left(1 - x \frac{x^2}{4}\right) \left(1 + \frac{x}{4}\right) \quad (3.32)$$

$$x = \frac{q}{k_F}, x \in [0, 2] \quad (3.33)$$

$$V_{\Gamma} = \frac{4\pi k_F^3}{3} \left(1 - \frac{3x}{4} + \frac{x^3}{16}\right) \quad (3.34)$$

Таким образом:

$$E_1 = -4\pi e^2 \frac{V}{(2\pi)^6} \frac{4\pi k_F^3}{3} \int_0^{2k_F} 4\pi \frac{q^2}{q^2} \left(1 - \frac{3x}{4} + \frac{x^3}{16}\right) dq = -e^2 \frac{V k_F^4}{4\pi^3} \quad (3.35)$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (3.36)$$

n – концентрация.

Найдем удельную энергию:

$$\frac{E_1}{N} = -\frac{3e^2}{4\pi} k_F \quad (3.37)$$

По характеру энергия является обменной энергией. Знак свидетельствует о притяжении. Осуществляется обменное взаимодействие.

$$\vec{k} \longrightarrow \vec{k}' - \vec{q} \quad (3.38)$$

$$\vec{k}' \longrightarrow \vec{k} + \vec{q} \quad (3.39)$$

В данном случае:

$$\sigma = \sigma' \quad (3.40)$$

Такие электроны не могут располагаться близко по принципу Паули. Общая энергия меньше, чем могла бы быть при близком взаимодействии. Обменная энергия – квантовый эффект.

Несостоятельность второго и более высоких порядков теории возмущений

Могут быть эффекты, где важна вторая поправка. Однако в данном случае при вычислении E_2 не выйдет получить поправку к поправке (как в случае вычисления

E_1). Результат будет не уточнен, а искажен. Из квантовой теории известно соотношение для E_2 :

$$E_2 = \sum_{m, m \neq F} \frac{\langle F|V_1|m \rangle \langle m|V_1|F \rangle}{E_F - E_m} \quad (3.41)$$

Видим два матричных элемента. Определим, каким процессам соответствуют элементы. F – основное состояние (располагается под сферой Ферми). Над сферой Ферми расположены два электрона, переносящиеся в возбужденные позиции.

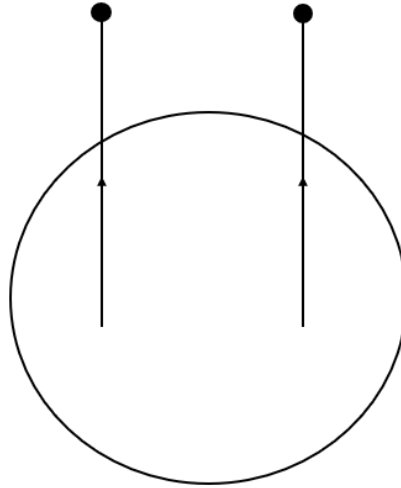


Рис. 3.3. К расчету второй поправки

Из возмущенного состояния два электрона должны быть возвращены в основное, иначе матричный элемент будет нулевым. Есть два варианта того, как это можно сделать. Первый способ – прямой процесс (электроны возвращаются в свои же исходные основные состояния). Второй способ – перекрестный или обменный процесс (электроны, перемещенные вверх, возвращаются на места друг друга).

Рассмотрим первый процесс.

$$E_2^{(d)} = \sum_{\vec{q}, |\vec{q}| \neq 0} \sum_{\vec{k} \sigma \vec{k}' \sigma'} \left(\frac{1}{2V} \frac{4\pi e^2}{q^2} \right)^2 \frac{1}{E_F - E_m} \theta(k_F - |\vec{k}|) \theta(k_F - |\vec{k}'|) \cdot \theta(-k_F + |\vec{k} + \vec{q}|) \theta(-k_F + |\vec{k} + \vec{q}|) \quad (3.42)$$

Итоговое выражение будет вести себя как:

$$E_2 = V \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{O(q)} \quad (3.43)$$

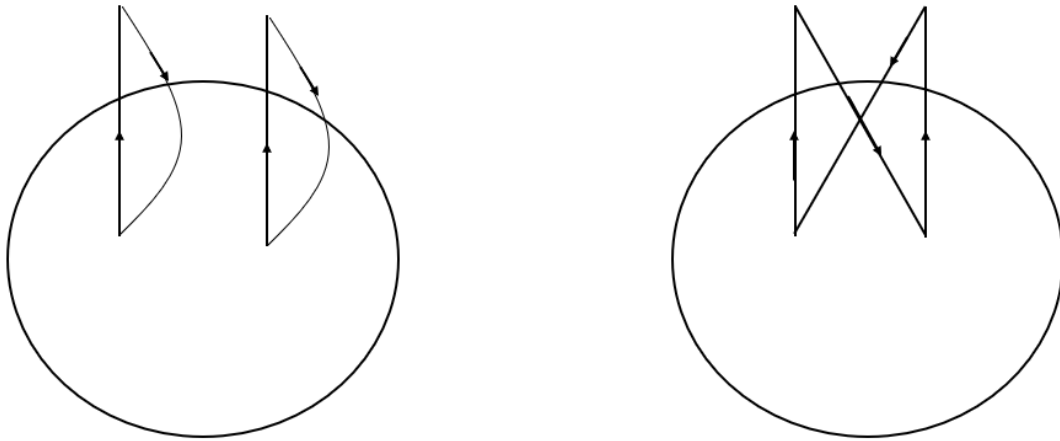


Рис. 3.4. Прямой и перекрестный (обменный) процесс

При $q \rightarrow 0$ интеграл расходится. Вторая поправка значительно превышает первую и приносит расходимость. Подключение второго процесса не в силах исправить ситуацию. Третий порядок теории возмущений также приносит расходимость. Энергия должна быть конечной, при суммировании всего ряда теории возмущений расходимость сократится, иначе полная энергия бы расходилась (это нефизично). Необходим другой метод, а именно введение функций Грина. С этой математической абстракцией удобно работать, она позволяет рассчитать эффекты экранировки, а также снять все сложности.

Функции Грина действительного времени

Теорию возмущений удобнее построить с помощью функций Грина мнимого времени. Однако для рассмотрения физического смысла будем строить именно функции Грина действительного времени.

Представление Гейзенберга

Эволюция во времени волновых функций в представлении Гейзенберга переносится на операторы, далее операторы приобретают зависимость от времени. Найдем

среднее от оператора, который имеет зависимость от времени:

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi_s(t) | A | \Psi_s(t) \rangle = \langle \Psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | \Psi(0) \rangle \quad (3.44)$$

Рассматриваем консервативные системы, где гамильтониан явно не имеет зависимости от времени.

$$e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = A(t) \quad (3.45)$$

Можно доказать (), : $\frac{i}{\hbar}[H, A] = \frac{dA(t)}{dt}$ (3.46)

Квантовомеханический вид распределения Гиббса

Для произвольной температуры распределение дается распределением Гиббса. Нулевая температура – абстракция.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} A_n \quad (3.47)$$

E_n – это стационарное состояние гамильтониана:

$$E_n = \langle n | H | n \rangle \quad (3.48)$$

A_n – это собственные значения оператора A в энергетическом базисе:

$$A_n = \langle n | A | n \rangle \quad (3.49)$$

$$\beta = \frac{1}{\theta} \quad (3.50)$$

Получим след.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} A_n \langle n | n \rangle = [\langle n | n \rangle = 1] = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} \cdot A | n \rangle \quad (3.51)$$

Воспользовались тем, что A – некоторая наблюдаемая. Учтем нормировку:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} \cdot A | n \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} A) \quad (3.52)$$

$\hat{\rho}$ – статистический оператор, явный вид которого:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (3.53)$$

Получим $\hat{\rho}$ в другом эквивалентном виде. Добавим условие полноты.

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \sum_n |n\rangle \langle n| = \sum_n \frac{e^{-\beta H}}{Z} |n\rangle \langle n| = \sum_n |n\rangle \langle n| \omega_n \langle n| \langle n| \quad (3.54)$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \quad (3.55)$$

n – некий ортонормированный базис.

Свойства полученного оператора соответствуют матрице плотности. Такой оператор должен быть эрмитовым:

$$\rho^\dagger = \rho \quad (3.56)$$

Важное свойство – нормировка на единицу:

$$\text{Tr}\rho = 1 \quad (3.57)$$

Будем рассматривать еще и большое каноническое распределение Гиббса. Актуальный оператор будет иметь расширенный вид:

$$\rho = \frac{e^{-\beta(H-\mu N)}}{Z} = \frac{e^{-\beta\tilde{H}}}{Z} \quad (3.58)$$

\tilde{H} – расширенный гамильтониан.

Функции Грина*. Представление Гейзенберга. Квантово-механический вид распределения Гиббса. Спин-независимый гамильтониан, трансляционно-инвариантный потенциал

**Определения функций Грина. Физический смысл. Функция Грина идеальной системы*

Функции Грина действительного времени. Продолжение

Получили эффективный гамильтониан с сокращенным числом слагаемых. Было решено применять подход теории возмущений, однако во втором порядке встретились с математическими трудностями, которые не разрешимы в более высоких порядках. Принято решение использовать подход функций Грина. Перейдем к представлению Гейзенберга.

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} A e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \quad (4.1)$$

Уравнение движения описывает эволюцию оператора:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)] \quad (4.2)$$

Распределение Гиббса задает микроскопические свойства системы:

$$A = \langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) \quad (4.3)$$

ρ – статистический оператор.

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (4.4)$$

$$\beta = \frac{1}{\theta} \quad (4.5)$$

Будем далее считать, что:

$$k_B = 1 \quad (4.6)$$

Статистическая сумма:

$$Z = \sum_n e^{-\beta H} \quad (4.7)$$

Фон Нейман предложил переписать в следующем виде:

$$\rho = \sum_n \omega_n |n\rangle \langle n| \quad (4.8)$$

Будет удобно проводить рассмотрение в большом каноническом распределении Гиббса:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \bar{H}} \quad (4.9)$$

Причем

$$\bar{H} = H - \mu N \quad (4.10)$$

Определение функций Грина

Воспользуемся большим каноническим распределением Гиббса и введем коррелятор:

$$C(t, t') = \langle A(t) B(t') \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta H} A(t) B(t')] \quad (4.11)$$

Подразумевается просто усреднение по распределению. При нахождении среднего нужно обращать на зависимость гамильтониана от времени. В нашем случае зависимости от времени нет.

Запишем причинную корреляционную функцию:

$$C^T(t, t') = -i \langle T A(t) B(t') \rangle \quad (4.12)$$

$-i$ – не смысловой коэффициент, введен для удобства.

$$T A(t) B(t') = \begin{cases} A(t) B(t'), & t > t' \\ \pm B(t') A(t), & t < t' \end{cases} \quad (4.13)$$

Минус в последнем выражении берется, если рассматривается нечетное число фермионных операторов.

Введем запаздывающую корреляционную функцию:

$$C^R(t, t') = -i \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_+ \rangle \neq 0, t > t' \quad (4.14)$$

$\theta(t - t')$ – ступенька. Закладывается причинная обусловленность явлений.

Опережающая корреляционная функция не несет физического смысла, однако запишем ее определение:

$$C^A(t, t') = i \theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')]_+ \rangle \neq 0, t < t' \quad (4.15)$$

Докажем, что корреляторы имеют более простой вид для консервативной системы. Для начала запишем развернутое распределение:

$$\begin{aligned}
 C^R(t, t') &= -i\theta(t-t') \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-i\beta\bar{H}} e^{i\bar{H}t} A e^{-i\bar{H}t} \cdot B e^{i\bar{H}t} e B e^{-i\bar{H}t'} + \\
 &+ e^{-\beta\bar{H}} e^{i\bar{H}t'} B e^{-i\bar{H}t'} e^{i\bar{H}t} A e^{-i\bar{H}t}] = -i\theta(t-t') \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}} e^{i\bar{H}(t-t')} A e^{-i\bar{H}(t-t')} B + \\
 &+ e^{-\beta\bar{H}} B e^{i\bar{H}(t-t')} A e^{-i\bar{H}(t-t')}] = -i\theta(t-t') \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}} [A(t-t') B(0)]_+] \\
 &= C^R(t-t')
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Везде $\hbar = 1$. Получили однородную по времени функцию. Это свойство важно запомнить.

Функция Грина – частный случай.

$$A = \Psi_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_n \varphi_n(\vec{r}) a_{n\sigma} \tag{4.17}$$

$$B = \Psi_{\sigma}^+(\vec{r}) \tag{4.18}$$

Запишем причинную функцию Грина:

$$G(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') = -i \langle T \Psi_{\sigma}(\vec{r}, t) \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', t') \rangle \tag{4.19}$$

Запаздывающая функция Грина:

$$G^R(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') = -i\theta(t-t') \langle [\Psi_{\sigma}(\vec{r}, t), \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', t')]_+ \rangle \tag{4.20}$$

Опережающая функция Грина:

$$G^A(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') = i\theta(t-t') \langle [\Psi_{\sigma}(\vec{r}, t), \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', t')]_+ \rangle \tag{4.21}$$

Корреляторы сами по себе находят большое применение в практической работе, особенно для исследований в режиме сильных связей.

Введем повышающую и понижающую функции Грина:

$$G^>(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') = -i \langle \Psi_{\sigma}(\vec{r}, t) \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', t') \rangle \tag{4.22}$$

$$G^<(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') = i \langle \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', t') \Psi_{\sigma}(\vec{r}, t) \rangle \tag{4.23}$$

Физический смысл функций Грина

Рассмотрим причинную функцию Грина при $t > t'$.

$$\begin{aligned} iG(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') &= \langle T\Psi_\sigma(\vec{r}, t)\Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', t') \rangle = \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}}\Psi_\sigma(\vec{r}, t)\Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', t')] \end{aligned} \quad (4.24)$$

Рассмотрим такие вектора $|n\rangle$:

$$\bar{H}|n\rangle = \bar{E}_n|n\rangle \quad (4.25)$$

$$\bar{H} = H - \mu N \quad (4.26)$$

Тогда:

$$iG = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta\bar{E}_n} \langle n|e^{i\bar{H}t}\Psi_\sigma(\vec{r})e^{-i\bar{H}(t-t')}\Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}')e^{-i\bar{H}t'}|n\rangle \quad (4.27)$$

$$|\beta\rangle = \Psi_\sigma^+(\vec{r})e^{-i\bar{H}t}|n\rangle \quad (4.28)$$

$$|\alpha\rangle = e^{-i\bar{H}(t-t')}\Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}')e^{-i\bar{H}t'}|n\rangle \quad (4.29)$$

Физический смысл: функция Грина анализирует результаты добавления частиц в систему.

Спин-независимый гамильтониан. Трансляционно-инвариантный потенциал

Рассмотрим частный случай.

$$\bar{H} = H - \mu N \quad (4.30)$$

Нет механизмов, переворачивающих спин. Будем предполагать, что разумно представление в виде:

$$G^R(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') = \delta_{RR'}G^R(\vec{r}\sigma t, \vec{r}'\sigma' t') \quad (4.31)$$

Если система консервативна:

$$G^R(\vec{r}, \vec{r}', \sigma, \sigma', t - t') \quad (4.32)$$

Пусть $t' = 0$ – перенесем начало отсчета в нуль по времени. Рассмотрим такой потенциал, который зависит только от разности векторов:

$$\bar{H}(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.33)$$

Необходимо ввести оператор трансляции:

$$T(\vec{r}) = e^{-i\vec{P}\vec{r}} \quad (4.34)$$

$$[T, H] = 0 \quad (4.35)$$

$$T^+(\vec{r}) = e^{i\vec{P}\vec{r}} = T(-\vec{r}) \quad (4.36)$$

$$\Psi_\sigma(\vec{r}) = T(\vec{r})\Psi_\sigma(\vec{0})T^{-1}(\vec{r}) \quad (4.37)$$

$$Tr[e^{-\beta\bar{H}}\Psi_\sigma(\vec{r}, t)T^{-1}(-\vec{r}')\Psi_\sigma^+(\vec{0})]Tr[e^{-\beta\bar{H}}\Psi_\sigma(\vec{r}-\vec{r}', t)\Psi_\sigma^+(\vec{0})] \quad (4.38)$$

Удобно переписать функцию Грина в представлении через импульсы. Получим Фурье-представление.

$$\Psi_\sigma(\vec{r}-\vec{r}', t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} a_{\vec{k}\sigma}(t) \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned} G^R(\vec{r}-\vec{r}', \sigma, t) &= -i\theta(t) \langle [\Psi_\sigma(\vec{r}-\vec{r}', t), \Psi_\sigma^+(\vec{0}, 0)]_+ \rangle = \\ &= -i\theta(t) \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1}{V} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \langle [a_{\vec{k}\sigma}(t), a_{\vec{k}'\sigma}^+(0)]_+ \rangle \end{aligned} \quad (4.40)$$

Чтобы избавиться от одной из сумм, сделаем следующее: сместим все вектора на \vec{R} .

$$\begin{aligned} -i\theta(t) \langle [\Psi_\sigma(\vec{r}-\vec{r}'+\vec{R}, t) \Psi_\sigma^+(\vec{R}, 0)]_+ \rangle = \\ = -i\theta(t) \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1}{V} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}'+\vec{R})} e^{-i\vec{k}'\vec{R}} \langle [a_{\vec{k}\sigma}(t), a_{\vec{k}'\sigma}^+(0)]_+ \rangle \end{aligned} \quad (4.41)$$

В силу произвольности \vec{R} :

$$e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{R}} = 1 \quad (4.42)$$

Отсюда:

$$\vec{k} = \vec{k}' \quad (4.43)$$

Двойная сумма снимается, запишем финальное выражение:

$$\begin{aligned} G^R(\vec{r}-\vec{r}', \sigma, t) &= -i\theta(t) \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \langle [a_{\vec{k}\sigma}(t), a_{\vec{k}\sigma}^+(0)]_+ \rangle = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} G^R(\vec{k}, \sigma, t) \end{aligned} \quad (4.44)$$

Для причинной функции Грина, повторяя выкладку, получаем:

$$G(\vec{k}, \sigma, t) = -i \langle T a_{\vec{k}\sigma}(t) a_{\vec{k}\sigma}^+(0)^+ \rangle \quad (4.45)$$

Функция Грина идеальной системы

Будем рассматривать гамильтониан (в представлении вторичного квантования):

$$H = \sum_k E_k a_k^+ a_k \quad (4.46)$$

$$\bar{H} = \sum_k (E_k - \mu) a_k^+ a_k \quad (4.47)$$

$$N = \sum_k a_k^+ a_k \quad (4.48)$$

Основным определяющим уравнением в представлении Гейзенберга является уравнение эволюции:

$$\frac{d}{dt} a_k(t) = \frac{i}{\hbar} [\bar{H}, a_k(t)], \quad \hbar \longrightarrow 1 \quad (4.49)$$

$$[\bar{H}, e^{i\bar{H}t} a_k e^{-i\bar{H}t}] = e^{i\bar{H}t} [\bar{H}, a_k] e^{-i\bar{H}t} = e^{i\bar{H}t} \sum_p \varepsilon_p [a_p^+ a_p, a_k] e^{-i\bar{H}t} \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} [a_p^+ a_p, a_k] &= a_p^+ p a_p a_k - a_k a_p^+ a_p = \\ &= -(-a_k a_p^+ + \delta_{kp}) a_p - a_k a_p^+ a_p = -\delta_{kp} a_p \end{aligned} \quad (4.51)$$

Таким образом уравнение движения:

$$\frac{d}{dt} a_k(t) = i e^{i\bar{H}t} (-\varepsilon_k) a_k e^{-i\bar{H}t} = -i \varepsilon_k a_k(t) \quad (4.52)$$

Получили простейшее дифференциальное уравнение. Запишем решение:

$$a_k(t) = e^{-i\varepsilon_k t} \cdot a_k(0) \quad (4.53)$$

Запишем запаздывающую функцию, пользуясь импульсным представлением:

$$\begin{aligned} G^R(k, t) &= -i\theta(t) \langle [a_k(t), a_k^+(0)]_+ \rangle = -i\theta(t) e^{-i\varepsilon_k t} \langle [a_k(0), a_k^+(0)]_+ \rangle = \\ &= -i\theta(t) e^{-i\varepsilon_k t} \end{aligned} \quad (4.54)$$

Здесь $k = (\vec{k}, \sigma)$.

$$\langle [a_k(0), a_k^+(0)]_+ \rangle = \delta_{kk} = 1 \quad (4.55)$$

Применим Фурье-преобразование, но не по пространству, а по времени. В частотном представлении явно видны полюса.

$$G^R(k, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(k, t) e^{i\omega t} dt = -i \int_0^{+\infty} e^{-i\varepsilon_k t} e^{i\omega t} dt \quad (4.56)$$

Интеграл в таком виде не сходится, видны осциллирующие части.

$$\begin{aligned}
 -i \int_0^{+\infty} e^{-i\varepsilon_k t} e^{i\omega t} dt &= - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} e^{i(\omega - \varepsilon_k)t - \eta t} dt = \\
 &= - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{e^{i(\omega - \varepsilon_k)t - \eta t} \Big|_0^{\infty}}{i(\omega - \varepsilon_k + i\eta)} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i0^+}
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

Получили невзаимодействующую запаздывающую функцию Грина. Знак «+» в знаменателе соответствует правилу обхода полюсов. В случае опережающей функции знак изменится. Полюса находятся на энергиях возбужденных состояний.

$$G^R(k, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(k, \varepsilon)}{\omega - \varepsilon + i\eta} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \tag{4.58}$$

Функция спектральной плотности $A(k, \varepsilon)$ пересчитывает полюса и их кратность. Она распространена в научной деятельности. Для идеальной системы:

$$A(k, \varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \tag{4.59}$$

δ -пики на возбужденных состояниях. Вид функции меняется, когда система от идеальной становится системой с взаимодействием. Пики будут расширяться, центр будет указывать на энергию взаимодействия. Без взаимодействия стационарные состояния остаются нетронутыми.

Теория линейного отклика. Уравнение движения для причинной функции Грина

Функции Грина действительного времени. Продолжение

Функции Грина упрощаются в некоторых случаях. Например, выражение для запаздывающей функции Грина:

$$G^R(k, t) = -i\theta(t) \langle [a_k(t), a_k^+(0)]_+ \rangle \quad (5.1)$$

Здесь произведено усреднение по ансамблю Гиббса. Для идеальной системы эту функцию можно найти явно. У такой функции Грина есть физический смысл, как и у корреляционной функции.

Теория линейного отклика

Можно изучать изменения свойства системы по отношению к внешнему полю. Пусть в момент времени t' вносится возмущение в позиции \vec{r}' . Будем описывать вклад внешнего поля в гамильтониан при помощи дополнительного гамильтониана:

$$H^{ex}(t) = \int d\vec{r} F(\vec{r}, t) A(\vec{r}) \quad (5.2)$$

$F(\vec{r}, t)$ – функция, играющая роль обобщенной силы. $A(\vec{r})$ вычисляется по характеристикам системы.

Пример с электрическим полем:

$$H^{ex}(t) = \int d\vec{r} \varphi(\vec{r}, t) \rho(\vec{r}) \quad (5.3)$$

$$\rho(\vec{r}) = -en(\vec{r}) \quad (5.4)$$

В нашем примере обобщенная сила:

$$F(\vec{r}, t) = -e\varphi(\vec{r}, t) \quad (5.5)$$

Оператор, характеризующий систему:

$$A(\vec{r}) = n(\vec{r}) \quad (5.6)$$

n – плотность числа частиц.

При включении поля появляется разность между наблюдаемым при включенном поле и невозмущенной ситуацией:

$$\delta \langle A \rangle = \langle A \rangle' - \langle A \rangle \quad (5.7)$$

Линейность означает, что считаем отклонение малым. То есть, функция является линейной по выражению:

$$\delta \langle A \rangle(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' dt' \xi(\vec{r}, t, \vec{r}', t') F(\vec{r}', t') \quad (5.8)$$

а) Рассмотрим полный гамильтониан системы.

$$H + H^{ex}(t), t > t_0 \quad (5.9)$$

Во время до t_0 будет обычная эволюция:

$$t < t_0: |\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\Psi(0)\rangle \quad (5.10)$$

При включении поля ситуация меняется.

$$t > t_0: i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = (H + H^{ex}(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (5.11)$$

Будем искать решение уравнения в виде:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} U(t) |\Psi(0)\rangle \quad (5.12)$$

Ограничение – начальное условие:

$$U(t) = 1, t < t_0 \quad (5.13)$$

$$i \left((-iH) e^{-iHt} U(t) + e^{-iHt} \frac{dU}{dt} \right) |\Psi(0)\rangle = (H + H^{ex}(t)) e^{-iHt} U(t) |\Psi(0)\rangle \quad (5.14)$$

$$ie^{-iHt} \frac{dU(t)}{dt} |\Psi(0)\rangle = H^{ex}(t) e^{-iHt} U(t) |\Psi(0)\rangle \quad (5.15)$$

$$i \frac{dU}{dt} = e^{iHt} H^{ex}(t) e^{-iHt} U \quad (5.16)$$

$$i \frac{dU}{dt} = H_H^{ex}(t) U \quad (5.17)$$

Запишем решение уравнения в виде:

$$U(t) = 1 - i \int_{t_0}^t H_H^{ex} U(t') dt' \quad (5.18)$$

«1» появляется из начальных условий.

б) Найдем матричные элементы. Рассмотрим оператор A в базисе для гамильтониана H . Система является невозмущенной.

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (5.19)$$

Такое состояние в момент времени t эволюционирует при помощи оператора экспоненциального вида:

$$|n_1t\rangle = e^{-iHt}|n\rangle \quad (5.20)$$

$$\langle n_1t|A|n_1t\rangle = \langle n|e^{iHt}Ae^{-iHt}|n\rangle = \langle n|A_H(t)|n\rangle \quad (5.21)$$

После включения поля при $t > t_0$ ситуация изменится:

$$\begin{aligned} \langle n_1t|a|n_1t\rangle &= \langle n|U^+(t)e^{iHt}Ae^{-iHt}U(t)|n\rangle = \langle n|U^+(t)A_H(t)U(t)|n\rangle = \\ &= \langle n|\left(1 + i\int_{t_0}^t H^{ex}(t')dt'\right)A_H(t)\left(1 - i\int_{t_0}^t H_H^{ex}(t')dt'\right)|n\rangle \end{aligned} \quad (5.22)$$

Использовали предположение о линейности. Раскроем скобки:

$$\begin{aligned} \langle n_1t|a|n_1t\rangle &= \langle n|\left(1 + i\int_{t_0}^t H^{ex}(t')dt'\right)A_H(t)\left(1 - i\int_{t_0}^t H_H^{ex}(t')dt'\right)|n\rangle = \\ &= \langle n|A_H(t)|n\rangle - i\int_{t_0}^t \langle n|[A_H(t), H_H^{ex}(t')]|n\rangle dt' + \dots \end{aligned} \quad (5.23)$$

Сравниваем среднее после включения взаимодействия со средним до включения. Разность в первом порядке теории возмущений – интегральное соотношение:

$$\delta \langle n_1t|A|n_1t\rangle = -i\int_{t_0}^t \langle n|[A_H(t), H_H^{ex}(t')]|n\rangle dt' \quad (5.24)$$

Получили конкретное микросостояние из всего набора. Необходимо провести усреднение по ансамблю Гиббса.

$\langle A \rangle(t, \vec{r}) = -i\int_{t_0}^t \langle [A_H(\vec{r}, t), H_H^{ex}(t')] \rangle dt'$ (5.25) Используем вид внешнего воздействия, с которого начали, то есть

$$H^{ex}(t) = \int d\vec{r} F(\vec{r}, t) A(\vec{r}) \quad (5.26)$$

$$\delta \langle A \rangle (\vec{r}, t) = -i \int_{t_0}^t dt' \int d\vec{r}' \langle [A_H(\vec{r}, t), A_H(\vec{r}', t')] \rangle F(\vec{r}, t) \quad (5.27)$$

Получили формулу Кубо, опубликованную в 1957 году.

Замечание

Изменение A не изменяет числа частиц.

$$[A, N] = 0 \quad (5.28)$$

$$A_H(\vec{r}, t) = e^{iHt} A(\vec{r}) e^{-iHt} = e^{i(H-\mu N)t} A(\vec{r}) e^{-i(H-\mu N)t} = A_{\bar{H}}(\vec{r}, t) \quad (5.29)$$

Значит, можно использовать расширенный гамильтониан.

$$\delta \langle A \rangle (\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \int dt' \xi(\dots) F(\vec{r}', t') \quad (5.30)$$

$$\xi(\vec{r}, t, \vec{r}', t') = -i\theta(t-t') \langle A_{\bar{H}}(\vec{r}, t), A_{\bar{H}}(\vec{r}', t') \rangle \quad (5.31)$$

Имеем возможность расширить область интегрирования по времени.

$$\int_{t_0}^t \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \quad (5.32)$$

$$F(\vec{r}', t') = 0, t' < t_0 \quad (5.33)$$

$$\theta(t-t') = 0, t < t' \quad (5.34)$$

Для идеальной системы воспользовались тем, что ее выражение через операторы рождения и уничтожения известны.

$$G^R(k, t) = -i\theta(t) \langle [a_k(t), a_k^+(t)]_+ \rangle \quad (5.35)$$

Получим другой вариант расчета функции Грина, который позволяет провести расчет напрямую.

Уравнение движения для запаздывающей функции Грина

Гамильтониан взаимодействующей системы:

$$\bar{H} = \bar{H}_0 + V = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + V \quad (5.36)$$

$$\varepsilon_k = E_k - \mu \quad (5.37)$$

Проведем дифференцирование по времени:

$$\frac{\partial}{\partial t} (iG^R(k, t)) = \delta(t) \langle [a_k(t), a_k^+(0)]_+ \rangle + \theta(t) \langle \left[\frac{\partial}{\partial t} a_k(t), a_k^+(0) \right]_+ \rangle \quad (5.38)$$

В первом слагаемом:

$$[a_k, a_k^+]_+ = 1 \quad (5.39)$$

Среднее от единицы – единица:

$$\langle 1 \rangle = 1 \quad (5.40)$$

Дифференцирование проводится при помощи уравнения Гайзерберга:

$$\frac{\partial}{\partial t} a_k(t) = i[\bar{H}, a_k(t)] = i[\bar{H}_0 + V, a_k(t)] \quad (5.41)$$

Посчитаем явно. Уже встречались с тем, что

$$[\bar{H}_0(t), a_k(t)] = -\varepsilon_k a_k(t) \quad (5.42)$$

Следовательно,

$$i \frac{\partial}{\partial t} G^R = \delta(t) + \theta(t) - \langle -i\varepsilon_k [a_k(t), a_k^+(0)] \rangle + \theta(t) \langle i[V(t), a_k(t), a_k^+(0)]_+ \rangle \quad (5.43)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} G^R = \delta(t) + \varepsilon_k G^R + F^R(k, t) \quad (5.44)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_k \right) G^R(k, t) = \delta(t) + F^R(k, t) \quad (5.45)$$

Получили уравнение движения для $G^R(k, t)$. Рассмотрим его частное решение для идеального газа электронов. В рассматриваемом случае $V = 0$:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_k \right) G^R(k, t) = \delta(t) \quad (5.46)$$

Для перехода от дифференциального уравнения к алгебраическому необходимо провести преобразование Фурье:

$$G^R(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int G^R(k, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (5.47)$$

$$(i(-i\omega) - \varepsilon_k) G^R(k, \omega) = 1 \quad (5.48)$$

$$G^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k} \quad (5.49)$$

Физическое условие:

$$G^R(k, t) \Big|_{t < 0} = 0 \quad (5.50)$$

Согласно этому определяющему соотношению получаем:

$$G^R(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{e; -i\omega t}{d} \omega \omega - \varepsilon_k \quad (5.51)$$

При отрицательном времени:

$$-i(\bar{\omega}i)t = \bar{\omega}t \quad (5.52)$$

Контур по лемме Жордана нужно замыкать сверху, не должно быть полюсов сверху.

$$\bar{\omega} > 0 \quad (5.53)$$

Полюс должен быть смещен.

$$\omega = \varepsilon_k - i0^+ \quad (5.54)$$

Функция Грина окончательно приобрела вид:

$$G^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + i0^+} \quad (5.55)$$

То есть, для этого метода не нужно рассчитывать коммутаторы.

Квантовая точка с одним уровнем

Рассмотрим пример практической задачи, в которой можно применять функцию Грина. Гамильтониан системы может быть записан в виде:

$$H = \sum_{\sigma} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} E + U N_{\uparrow} N_{\downarrow} \quad (5.56)$$

U – потенциал отталкивания, E – энергия уровня.

Уравнение движения:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - E \right) G^R(\sigma, t) = \delta(t) + F^R(\sigma, t) \quad (5.57)$$

$$F^R(\sigma, t) = \theta(t) \langle i[[UN_{\uparrow}N_{\downarrow}, a_{\sigma}(t)], a_{\sigma}^{\dagger}(0)]_+ \rangle \quad (5.58)$$

$$\begin{aligned} [N_{\uparrow}N_{\downarrow}, a_{\sigma}] &= N_{\uparrow}[N_{\downarrow}, a_{\sigma}] + [N_{\uparrow}, a_{\sigma}]N_{\downarrow} = \\ &= N_{\uparrow}(a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\downarrow}a_{\sigma} - a_{\sigma}a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\downarrow}) + [N_{\uparrow}, a_{\sigma}]N_{\downarrow} = N_{\uparrow} \left(- \left(-a_{\sigma}a_{\downarrow}^{\dagger} + \delta_{\sigma\downarrow} \right) a_{\downarrow} - a_{\sigma}a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\downarrow} \right) + \\ &+ [N_{\uparrow}, a_{\sigma}]N_{\downarrow} = N_{\uparrow}(-\delta_{\sigma\downarrow})a_{\downarrow} + [N_{\uparrow}, a_{\sigma}]N_{\downarrow} = -N_{\uparrow}\delta_{\sigma\downarrow}a_{\downarrow} - \delta_{\sigma\uparrow}a_{\uparrow}N_{\downarrow} = -N_{\sigma} \cdot a_{\sigma} \end{aligned} \quad (5.59)$$

$$[a_{\uparrow}a_{\downarrow}^{\dagger}] = 0 \quad (5.60)$$

$$F^R(\sigma, t) = -i\theta(t) \langle [UN_{\sigma}a_{\sigma}(t), a_{\sigma}^{\dagger}(0)]_+ \rangle \equiv U\Gamma^R(\sigma, t) \quad (5.61)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Gamma^R(\sigma, t) = \delta(t) \langle [N_{\bar{\sigma}}(t) a_{\sigma}(t), a_{\sigma}^+(0)]_+ \rangle + \\ + \theta(t) \langle [\dot{N}_{\bar{\sigma}}(t) a_{\sigma}(t), a_{\sigma}^+(0)]_+ \rangle + \theta(t) \langle [N_{\bar{\sigma}}(t) \dot{a}_{\sigma}(t), a_{\sigma}^+(0)]_+ \rangle \quad (5.62)$$

Рассмотрим первое слагаемое.

$$[N_{\bar{\sigma}}(0) a_{\sigma}(0), a_{\sigma}^+(0)]_+ = N_{\bar{\sigma}} a_{\sigma} a_{\sigma}^+ + a_{\sigma}^+ N_{\bar{\sigma}} a_{\sigma} = N_{\bar{\sigma}} (a_{\sigma} a_{\sigma}^+ + a_{\sigma}^+ a_{\sigma}) = N_{\bar{\sigma}} \cdot 1 = N_{\bar{\sigma}} \quad (5.63)$$

Таким образом, выражение для первого слагаемого::

$$\delta(t) \cdot \langle N_{\bar{\sigma}} \rangle \quad (5.64)$$

Квантовая точка с одним уровнем. Функции Грина мнимого времени

Функции Грина действительного времени. Продолжение

Квантовая точка с одним уровнем

Корреляторы могут быть использованы для оценки слабого влияния внешнего поля. Формула Грина позволяет связать их с токами в системе. Уравнение, которое позволяет определить функцию Грина:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_k\right) G^R(k, t) = \delta(t) + F^R(k, t) \quad (6.1)$$

$F^R(k, t)$ – взаимодействие коммутатора и антикоммутатора. Это альтернативный путь вычисления по определению. Одна из типовых систем – квантовая точка. Для этой системы:

$$H = E \sum_{\sigma} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + U N_{\uparrow} N_{\downarrow} \quad (6.2)$$

Вспомогательная функция:

$$\Gamma^R(\sigma, t) = -i\theta(t) \langle [N_{\bar{\sigma}}(t) a_{\sigma}(t), a_{\sigma}^{\dagger}(0)]_{+} \rangle \quad (6.3)$$

Увидим, как можно это использовать для упрощения исходного уравнения.

$$i\frac{\partial}{\partial t} \Gamma^R(\sigma, t) = (1) + (2) + (3) \quad (6.4)$$

$$(1) [N_{\bar{\sigma}}(0) a_{\sigma}(0), a_{\sigma}^{\dagger}(0)]_{+} = N_{\bar{\sigma}}(0) \cdot 1 \quad (6.5)$$

Тогда

$$(1) = \delta(t) \langle N_{\bar{\sigma}}(0) \rangle \quad (6.6)$$

Обработаем второе слагаемое:

$$(2) \frac{d}{dt} N_{\bar{\sigma}}(t) = i[H, N_{\bar{\sigma}}(t)] = 0 \quad (6.7)$$

Легко продемонстрировать, что

$$[N_{\sigma}, N_{\sigma'}] = 0 \quad (6.8)$$

Значит:

$$(2) = 0 \quad (6.9)$$

Для третьего слагаемого воспользуемся также уравнением движения:

$$\frac{d}{dt}a_{\sigma}(t) = i[H, a_{\sigma}(t)] = i\left[E \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} + UN_{\uparrow}N_{\downarrow}, a_{\sigma}(t)\right] \quad (6.10)$$

$$[a_p^{\dagger} a_p, a_k] = -\delta_{kp} a_p \quad (6.11)$$

$$[N_{\uparrow}N_{\downarrow}, a_{\sigma}] = -N_{\bar{\sigma}} a_{\sigma} \quad (6.12)$$

Тогда:

$$\frac{d}{dt}a_{\sigma}(t) = -i(Ea_{\sigma}(t) + UN_{\bar{\sigma}}(t)a_{\sigma}(t)) \quad (6.13)$$

$$N_{\bar{\sigma}}N_{\bar{\sigma}} = a_{\bar{\sigma}}^{\dagger} a_{\bar{\sigma}} a_{\bar{\sigma}}^{\dagger} a_{\bar{\sigma}} = a_{\bar{\sigma}}^{\dagger} a_{\bar{\sigma}} (-a_{\bar{\sigma}} a_{\bar{\sigma}}^{\dagger} + 1) = a_{\bar{\sigma}}^{\dagger} a_{\bar{\sigma}} = N_{\bar{\sigma}} \quad (6.14)$$

$$\begin{aligned} (3) = i\theta(t) < E[N_{\bar{\sigma}}(t)a_{\sigma}(t), a_{\sigma}^{\dagger}(0)]_{+} + U[N_{\bar{\sigma}}(t)a_{\sigma}(t), a_{\sigma}^{\dagger}(0)]_{+} > = \\ = (E + U)\Gamma^R(\sigma, t) \end{aligned} \quad (6.15)$$

Получаем уравнение:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Gamma^R(\sigma, t) = \delta(t) < N_{\bar{\sigma}}(0) > + (E + U)\Gamma^R(\sigma, t) \quad (6.16)$$

Решение:

$$\Gamma^R(\sigma, t) = \frac{1}{2\pi} \int \Gamma^R(\sigma, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (6.17)$$

$$(\omega - (E + U))\Gamma^R(\sigma, \omega) = < N_{\bar{\sigma}}(0) > \quad (6.18)$$

Отсюда:

$$\Gamma^R(\sigma, \omega) = \frac{< N_{\bar{\sigma}}(0) >}{\omega - (E + U) + i0^{+}} \quad (6.19)$$

Исходная функция Грина должна зануляться при отрицательных временах, поэтому получаем добавку к знаменателю.

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - E\right)G^R(\sigma, t) = \delta(t) + U\Gamma^R(\sigma, t) \quad (6.20)$$

$$(\omega - E)G^R(\sigma, \omega) = 1 + U\Gamma^R(\sigma, \omega) \quad (6.21)$$

$$(\omega - E)G^R(\sigma, \omega) = 1(\omega - E)\Gamma^R(\sigma, \omega) - < N_{\bar{\sigma}}(0) > \quad (6.22)$$

$$G^R(\sigma, \omega) = \frac{1 - < N_{\bar{\sigma}} >}{\omega - E + i0^{+}} + \frac{< N_{\bar{\sigma}} >}{\omega - (E - U) + i0^{+}} \quad (6.23)$$

Есть два полюса – на энергии E и на энергии $(E + U)$.

$$H = E \sum_{\sigma} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + UN_{\uparrow}N_{\downarrow} \quad (6.24)$$

Функция Грина содержит полную информацию о системе.

Функция Грина мнимого времени

Сложный потенциал невозможно разложить с помощью теории возмущений, поэтому перейдем к рассмотрению функции Грина мнимого времени. Вспомним:

$$\langle A(t)B(0) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}} e^{iHt} A e^{-iHt} B] \quad (6.25)$$

Избавимся от мнимости в преобразовании. Введем параметр

$$\tau = it \in \mathbb{R} \quad (6.26)$$

Модифицируем преобразование Гейзенберга:

$$A(\tau) = e^{\bar{H}\tau} A e^{-\bar{H}\tau} \quad (6.27)$$

$$\bar{H} = H - \mu N \quad (6.28)$$

Коррелятор:

$$C^T(\tau, \tau') = - \langle T A(\tau) B(\tau') \rangle, \tau > \tau' \quad (6.29)$$

Получили Мацубаровскую функцию.

$$C^T(\tau, \tau') = -\theta(\tau - \tau') \langle A(\tau) B(\tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle B(\tau') A(\tau) \rangle \quad (6.30)$$

Для консервативной системы, то есть когда гамильтониан не зависит явно от времени, можно записать:

$$C^T(\tau, \tau') = C^T(\tau - \tau') \quad (6.31)$$

Видно инвариантность относительно сдвига во времени. Вся временная нагрузка относится к оператору A .

Введем определение:

$$G(\vec{r}\sigma\tau, \vec{r}'\sigma'\tau') = - \langle T |\Psi_\sigma(\vec{r}, \tau) \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', \tau') \rangle \quad (6.32)$$

$$\Psi_\sigma(\vec{r}, \tau) = e^{\bar{H}\tau} \Psi_\sigma(\vec{r}) e^{-\bar{H}\tau} \quad (6.33)$$

$$\Psi_\sigma^+(\vec{r}, \tau) = e^{\bar{H}\tau} \Psi_\sigma^+(\vec{r}) e^{-\bar{H}\tau} \quad (6.34)$$

Смысл у функции Грина мнимого времени такой же, как и у функции Грина вещественного времени. Упрощающее предположение также работает. Пусть \bar{H} – спиннезависимый гамильтониан. Тогда функции Грина такие, что ненулевые значения будут при

$$\sigma = \sigma' \quad (6.35)$$

Это следует из физических соображений.

В консервативной системе функция Грина зависит от разности времен:

$$G = G(\dots, \tau - \tau') \quad (6.36)$$

Если взаимодействие трансляционно-инвариантное, то:

$$G = G(\dots, \vec{r} - \vec{r}') \quad (6.37)$$

Для такого случая можно получить упрощение:

$$G(\vec{r} - \vec{r}', \sigma\tau) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \cdot G(\vec{k}, \sigma, \tau) \quad (6.38)$$

Можно указать определение функции Грина в пространстве волновых векторов:

$$G(\vec{k}, \sigma, \tau) = - \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \rangle \quad (6.39)$$

$$k = (\vec{k}, \sigma) \quad (6.40)$$

Полевой оператор:

$$\Psi_\sigma(\vec{r}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}\sigma}(\tau) \quad (6.41)$$

Полевой оператор:

$$\Psi_\sigma^+(\vec{r}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}\sigma}^+(\tau) \quad (6.42)$$

Периодичность

Свойства базируются на том, что спектр дискретен. Рассмотрим коррелятор

$$\begin{aligned} C^T(\tau > 0) &= - \langle A(\tau) B(0) \rangle = - \frac{1}{2} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}} e^{\bar{H}\tau} A e^{-\bar{H}\tau} B] = \\ &= - \frac{1}{2} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}} B e^{-\beta\bar{H}} e^{\bar{H}\tau} A e^{-\bar{H}\tau} e^{\beta\bar{H}}] = - \frac{1}{2} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}} B(0) A(\tau - \beta)] = \\ &= - \langle B(0) A(\tau - \beta) \rangle = -C^T(\tau - \beta) \end{aligned} \quad (6.43)$$

Получили свойство периодичности. Знак минус не возникает для бозонов. Для $\tau \in [-\beta, \beta]$. Получили периодическую функцию, которую можно разложить в ряд Фурье.

$$C^T(\tau) = - \frac{1}{\beta} \sum_n C^T(\omega_n) e^{-i\omega_n\tau} \quad (6.44)$$

Для фермионов:

$$e^{-i\omega_n\tau} = -e^{i\omega_n(\tau-\beta)} \quad (6.45)$$

Таким образом, для фермионов:

$$e^{i\omega_n\beta} = -1 \quad (6.46)$$

Для бозонов:

$$e^{i\omega_n\beta} = 1 \quad (6.47)$$

Можем конкретизировать те ω_n , которые устраивают:

$$\omega_n\beta = \pi + 2\pi n, n \in Z \quad (6.48)$$

Получили мацубаровские частоты для фермионов.

Получим выражение для коррелятора в частотном представлении, а именно коэффициенты $C^T(\omega_n)$. Применим обратное преобразование.

$$\begin{aligned} \int_{-\beta}^{\beta} C^T(\tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau &= \frac{1}{\beta} \sum_n C^T(\omega_n) \int_{-\beta}^{\beta} e^{i(\omega_m - \omega_n)\tau} d\tau = \frac{1}{\beta} \sum_n C^T(\omega_n) \int_{-\beta}^{\beta} e^{i\frac{2\pi}{\beta}(m-n)\tau} d\tau = \\ &= \frac{1}{\beta} C^T(\omega_m) \cdot 2\beta = 2C^T(\omega_m) \end{aligned} \quad (6.49)$$

Воспользуемся свойством периодичности.

$$C^T(\omega_m) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} C^T(\tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 C^T(\tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} C^T(\tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau \quad (6.50)$$

Доказали, что

$$C^T(\tau) = -C^T(\tau - \beta) \quad (6.51)$$

Тогда:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 (-C^T(\tau - \beta)) e^{i\omega_m\tau} d\tau + \frac{1}{2} \int_0^{\beta} C^T(\tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^0 C^T(\tau + \beta) e^{i\omega_m(\tau + \beta)} d\tau + \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^{\beta} C^T(\tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau = \int_0^{\beta} C^T(\tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau \end{aligned} \quad (6.52)$$

Воспользовались тем, что

$$e^{i\omega_m\beta} = -1 \quad (6.53)$$

Связь с термодинамическими характеристиками

Рассмотрим связь мацубаровских функций с термодинамическими характеристиками. Можно напрямую связать значение функции Грина с наблюдаемыми. Начнем со среднего числа частиц. Для этого рассмотрим:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} G(\vec{r}\sigma\tau, \vec{r}\sigma\tau^+) &= - \sum_{\sigma} \langle T\Psi_{\sigma}(\vec{r}\tau)\Psi_{\sigma}^+(\vec{r}\tau^+) \rangle = \sum_{\sigma} \langle \Psi_{\sigma}^+(\vec{r}, \tau^+)\Psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau) \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}e^{\hat{H}\tau}\Psi_{\sigma}^+(\vec{r})e^{-\hat{H}\tau}e^{\hat{H}\tau}\Psi_{\sigma}(\vec{r})e^{-\hat{H}\tau}] = \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}} \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^+(\vec{r})\Psi_{\sigma}(\vec{r})] = \quad (6.54) \\ &= \langle \sum_{\sigma} N_{\sigma}(\vec{r}) \rangle = \langle N(\vec{r}) \rangle \end{aligned}$$

Здесь и далее:

$$\tau^+ = \tau + 0^+ \quad (6.55)$$

Получили плотность числа частиц.

Связь функций Грина мнимого времени с термодинамическими характеристиками и с функциями Грина вещественного времени

Функция Грина мнимого времени

Связь с термодинамическими характеристиками

Для идеализированной задачи вычислили вещественную функцию Грина и проанализировали полученный результат. Далее была введена функция Грина в мнимом времени, что означает представление, удобное для разложения в ряд теории возмущений. Периодичность – главное свойство таких функций. Далее было показано, что можно приписать физический смысл:

$$\sum_{\sigma} G(\vec{r}\sigma\tau, \vec{r}\sigma\tau^+) = \langle N(\vec{r}) \rangle \quad (7.1)$$

Второе время немного позднее первого:

$$\tau^+ = \tau + 0^+ \quad (7.2)$$

Полное число частиц:

$$N = \int_V \langle N(\vec{r}) \rangle d\vec{r} \quad (7.3)$$

Такие функции Грина несут явный физический смысл. Приведем еще два примера.

Пример

Будем рассматривать одночастичный оператор. Для наблюдаемых:

$$A_{\text{набл}} = \sum_i A_i \quad (7.4)$$

$$A_{\text{набл}} = \sum_{k,k'} \langle k|A|k' \rangle^+ a_k a_{k'} \quad (7.5)$$

Используем возможность для координатного представления. Среднее термодинамическое:

$$\begin{aligned} A &= \langle A_{\text{набл}} \rangle = \langle \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{nn'} \langle n', \sigma' | A | n\sigma \rangle a_{n'\sigma'}^+ a_{n\sigma} \rangle = \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{nn'} \int d\vec{r} \varphi_{n'}^*(\vec{r}) \langle \sigma' | A | \sigma \rangle \varphi_n(\vec{r}) \langle a_{n'\sigma'}^+ a_{n\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\Psi_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_n \varphi_n(\vec{r}) a_{n\sigma} \quad (7.7)$$

Среднее термодинамическое:

$$\begin{aligned} A &= \sum_{\sigma\sigma'} \int d\vec{r} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} A_{\sigma'\sigma}(\vec{r}) \langle \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}', \tau) \Psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau) \rangle = \\ &= - \sum_{\sigma\sigma'} \int d\vec{r} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} A_{\sigma'\sigma}(\vec{r}) \langle T \Psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau) \Psi_{\sigma'}^+(\vec{r}, \tau^+) \rangle = \\ &= \sum_{\sigma\sigma'} \int d\vec{r} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} A_{\sigma'\sigma}(\vec{r}) G(\vec{r}\sigma\tau, \vec{r}'\sigma'\tau^+) \end{aligned} \quad (7.8)$$

Подставим выражение для кинетической энергии.

$$E_k = T = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) \quad (7.9)$$

$$\langle T \rangle = \int_V d\vec{r} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \sum_{\sigma} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) G(\vec{r}\sigma\tau, \vec{r}'\sigma'\tau^+) \quad (7.10)$$

Пример. Потенциальная энергия взаимодействия

Рассмотрим двухчастичный оператор, когда есть взаимодействие между частицами. Через операторы рождения и уничтожения:

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{n_1\sigma_1} \dots \sum_{n_4\sigma_4} \langle n_1\sigma_1 n_2\sigma_2 | \hat{v} | n_3\sigma_3 n_4\sigma_4 \rangle a_{n_1\sigma_1}^+ a_{n_2\sigma_2}^+ a_{n_4\sigma_4} a_{n_3\sigma_3} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n_1\sigma_1} \dots \sum_{n_4\sigma_4} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \varphi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \langle \sigma_1\sigma_2 | \hat{v} | \sigma_3\sigma_4 \rangle \varphi_{n_3}(\vec{r}_1) \varphi_{n_4}(\vec{r}_2) a^+ a^+ a a \end{aligned} \quad (7.11)$$

$$\langle \sigma_1\sigma_2 | \hat{v} | \sigma_3\sigma_4 \rangle = v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \delta_{\sigma_1\sigma_3} \cdot \delta_{\sigma_2\sigma_4} \quad (7.12)$$

Можно ввести полевые операторы.

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Psi_{\sigma_1}^*(\vec{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^*(\vec{r}_2) v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1) \quad (7.13)$$

С этого представления можно начинать вывод среднего в термодинамическом смысле. Заметим, что уравнение движение может быть записано в виде:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau) = [\hat{H}, \Psi_{\sigma}(\vec{r}, \tau)] \quad (7.14)$$

Для фермионных операторов:

$$[AB, C] = A[B, C]_+ - [A, C]_+ B \quad (7.15)$$

Для идеальной системы:

$$\bar{H}_0 = \sum_{\sigma_1} \int d\vec{r}_1 \Psi_{\sigma_1}^+ (\vec{r}_1) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \mu \right) \Psi_{\sigma_1} (\vec{r}_1) \quad (7.16)$$

$$\begin{aligned} [\bar{H}_0, \Psi_{\sigma}] &= \sum_{\sigma_1} \int d\vec{r}_1 \left(\Psi_{\sigma_1}^+ \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \mu \right) \Psi_{\sigma_1}, \Psi_{\sigma} \right]_+ - \right. \\ &\quad \left. - [\Psi_{\sigma_1}^+, \Psi_{\sigma}]_+ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \mu \right) \Psi_{\sigma_1} \right) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \right) \Psi_{\sigma} (\vec{r}) \end{aligned} \quad (7.17)$$

Поскольку:

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \mu \right) \Psi_{\sigma_1}, \Psi_{\sigma} \right]_+ = 0 \quad (7.18)$$

$$\begin{aligned} [V, \Psi_{\sigma}] &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 [\Psi_{\sigma_1}^+ \Psi_{\sigma_2}^+, \Psi_{\sigma}] \nu \Psi_{\sigma_2} \Psi_{\sigma_1} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 (\Psi_{\sigma_1}^+ [\Psi_{\sigma_2}^+ \Psi_{\sigma}]_+ - \\ &\quad - [\Psi_{\sigma_1}^+, \Psi_{\sigma}]_+ \Psi_{\sigma_2}^+ \nu \Psi_{\sigma_2} \Psi_{\sigma_1}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \int d\vec{r}_1 \Psi_{\sigma_1}^+ \nu \Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\sigma_2} \int d\vec{r}_2 \Psi_{\sigma_2}^+ \nu \Psi_{\sigma_2} \Psi_{\sigma} = \\ &\quad = - \sum_{\sigma_1} \int d\vec{r}_1 \Psi_{\sigma_1}^+ \nu \Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma} \end{aligned} \quad (7.19)$$

Объединим результаты:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\sigma} = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu - \sum_{\sigma_1} \int d\vec{r}_1 \Psi_{\sigma_1}^+ \nu \Psi_{\sigma_1} \right) \Psi_{\sigma} \quad (7.20)$$

$$\sum_{\sigma_1} \int d\vec{r}_1 \Psi_{\sigma_1}^+ \nu \Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma} = \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \right) \Psi_{\sigma} \quad (7.21)$$

$$\sum_{\sigma_1} \int d\vec{r}_1 \Psi_{\sigma_1}^+ \Psi_{\sigma_1} \nu \Psi_{\sigma_1} \Psi_{\sigma} = \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \right) \Psi_{\sigma}^+ (\vec{r}', \tau') \Psi_{\sigma} (\vec{r}, \tau) \quad (7.22)$$

$$\langle \Psi_{\sigma}^+ (\vec{r}', \tau') \Psi_{\sigma} (\vec{r}, \tau) \rangle \Big|_{\tau' > \tau} = - \langle T \Psi_{\sigma} (\vec{r}, \tau) \Psi_{\sigma}^+ (\vec{r}', \tau') \rangle \Big|_{\tau' > \tau} = G(\vec{r} \sigma \tau, \vec{r}' \sigma \tau') \quad (7.23)$$

Добавляя $\sum_{\sigma} \int d\vec{r} \frac{1}{2}$ получаем:

$$\langle \bar{V} \rangle = \frac{1}{2} \int d\vec{r} \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \lim_{\tau' \rightarrow \tau^+} \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu \right) \sum_{\sigma} G(\vec{r} \sigma \tau, \vec{r}' \sigma \tau') \quad (7.24)$$

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle \quad (7.25)$$

Функции Грина обладают прямым физическим смыслом.

Связь функций Грина мнимого времени с функциями Грина вещественного времени

Физический смысл с точки зрения появления и уничтожения частиц в системе был у функции Грина вещественного времени. Необходима связь с функцией Грина мнимого времени. Будем отталкиваться от результатов, полученных ранее:

$$G(\vec{k}, \sigma, \omega_n) = \int_0^{\beta} G(\vec{k}, \sigma, \tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau \quad (7.26)$$

Рассмотрим функцию при положительных значениях τ .

$$g^>(k, \tau) = -\frac{1}{2} \text{Tr}[e^{-\beta \bar{H}} a_k(\tau) a_k^+(0)] \quad (7.27)$$

Возьмем специальный базис, в котором будем искать след:

$$\bar{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (7.28)$$

$$\bar{H} = H - \mu N \quad (7.29)$$

$$\begin{aligned} g^>(k, \tau) &= -\frac{1}{2} \sum_{n,m} \langle n|e^{-\beta \bar{H}} e^{\bar{H}\tau} a_k|m\rangle \langle m|e^{-\bar{H}\tau} a_k^+|n\rangle = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{(E_n - E_m)\tau} \langle n|a_k|m\rangle \langle m|a_k^+|n\rangle = \end{aligned} \quad (7.30)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-\varepsilon\tau} \frac{-2\pi}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle m|a_k^+|n\rangle |\delta(\varepsilon - (E_m - E_n))|^2 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-\varepsilon\tau} P^>(k, \varepsilon)$$

Ввели спектральную функцию $P^>(k, \varepsilon)$.

$$\begin{aligned} G(k, \omega_n) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} P^>(k, \varepsilon) \int_0^{\beta} e^{-(\varepsilon - i\omega_n)\tau} d\tau = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} P^>(k, \varepsilon) \frac{e^{-\varepsilon\beta} e^{i\omega_n\beta} - 1}{i\omega_n - \varepsilon} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{A(k\varepsilon)}{i\omega_n - \varepsilon} \end{aligned} \quad (7.31)$$

Тогда получаем связь:

$$A(k, \varepsilon) \equiv -P^>(k, \omega) \left(1 + e^{-\varepsilon\beta}\right) \quad (7.32)$$

Таким образом:

$$P^>(k, \omega) = \frac{-A(k, \varepsilon)}{1 + e^{-\varepsilon\beta}} = \frac{-A(k, \varepsilon) e^{\varepsilon\beta}}{e^{\varepsilon\beta} + 1} = -A(k, \varepsilon) (1 - F(\varepsilon)) \quad (7.33)$$

$F(\varepsilon)$ – распределение Ферми-Дирака.

Запишем получившиеся выражения. Для мнимой функции:

$$G(k, \omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon A(k, \omega)}{2\pi i\omega_n - \varepsilon} \quad (7.34)$$

Здесь есть ограничение на дискретность.

Для вещественной функции:

$$G^R(k, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon A(k, \varepsilon)}{2\pi \omega - \varepsilon + i0} \quad (7.35)$$

Введем функцию:

$$F(k, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon A(k, \varepsilon)}{2\pi z - \varepsilon} \quad (7.36)$$

$$G(k, \omega_n) = F(k, z = i\omega_n) \quad (7.37)$$

$$G^R(k, \omega) = F(k, z = \omega + i0^+) \quad (7.38)$$

Нужно найти промежуточное звено. Для получения функции Грина необходимо посчитать при положительных значения ω_n и продолжить на верхнюю полуплоскость. Находим выше вещественной оси $G(k, \omega_n)$, это будет $F(k, i\omega_n)$, которую необходимо аналитически продолжить на верхнюю полуплоскость. Далее делается замена:

$$z = \omega + i0^+ \quad (7.39)$$

Тогда:

$$G^R(k, \omega) = G(k, \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+} \quad (7.40)$$

Системы с взаимодействием, U-оператор

Закончили рассмотрение наблюдаемых, которые могут быть вычислены с помощью усреднения с помощью распределения Гиббса. Одночастичные наблюдаемые были рассмотрены на примере кинетической энергии, а двухчастичное взаимодействие на частном примере. Функции Грина содержат информацию о статистической системе. Если рассчитана функция Грина в мнимом времени

$$G(k, \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+} = G^R(k, \omega) \quad (8.1)$$

можно посмотреть отклик системы на добавление одной частицы.

Функция Грина мнимого времени

Пример: невзаимодействующая система

Рассмотрим гамильтониан

$$\bar{H}_0 = \sum_k (E_k - \mu) a_k^+ a_k = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \quad (8.2)$$

Для нее вычислим функцию Грина в мнимом времени. Из явного вида гамильтониана сначала получим спектральную функцию.

а. Функция спектральной плотности.

$$a(k, \epsilon) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} | \langle m | a_k^+ | n \rangle |^2 (1 + e^{-\epsilon\beta}) \delta(\epsilon - (E_m - E_n)) \quad (8.3)$$

β – обратная энергетическая температура. Посмотрим, когда матричный элемент отличен от нуля.

$$k = (\vec{k}, \sigma) \quad (8.4)$$

Разница энергий в новом и старом состоянии:

$$E_m - E_n = \epsilon_k \quad (8.5)$$

$$\langle n | a_k | m \rangle \langle m | a_k^+ | n \rangle = \langle n | a_k a_k^+ | n \rangle \quad (8.6)$$

Следовательно:

$$A(k, \epsilon) = \frac{2\pi}{Z} (1 - e^{-\epsilon\beta}) \delta(\epsilon - \epsilon_k) \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | a_k a_k^+ | n \rangle \quad (8.7)$$

$$\langle a_k a_k^+ \rangle = \langle -a_k^+ a_k + 1 \rangle = 1 - \langle a_k^+ a_k \rangle = 1 - F(\epsilon_k) \quad (8.8)$$

$$\left(1 + e^{-\epsilon_k \beta}\right) \left(1 - \frac{1}{e^{\epsilon_k \beta} + 1}\right) = 1 \quad (8.9)$$

$$A(k, \epsilon) = 2\pi \delta(\epsilon - \epsilon_k) \quad (8.10)$$

б. Согласно полученным ранее формулам:

$$G(k, \omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon A(k, \epsilon)}{2\pi i\omega_n - \epsilon} = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k} \quad (8.11)$$

$$G(k, \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+} = G^R(k, \omega) \quad (8.12)$$

$$G^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i0^+} \quad (8.13)$$

Воспроизвели результат другим путем. Функции Грина соотносятся с функциями Грина вещественного времени и не перемешивают мнимые и вещественные аргументы.

Системы с взаимодействием

U-оператор

U-оператор – аналог оператора эволюции.

$$H = H_0 + V \quad (8.14)$$

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + V \quad (8.15)$$

$$\tilde{H}_0 = H_0 - \mu N \quad (8.16)$$

Введем представление Дирака с учетом \tilde{H}_0 .

$$A(\tau) = e^{\tilde{H}_0 \tau} A e^{-\tilde{H}_0 \tau} \quad (8.17)$$

Перепишем операторы в представлении Гейзенберга в новых терминах $A(\tau)$. Сделаем это исходя из определений:

$$\begin{aligned} A_H(\tau) B_H(\tau') &= e^{\tilde{H}\tau} A e^{-\tilde{H}\tau} e^{\tilde{H}\tau'} B e^{-\tilde{H}\tau'} = \\ &= e^{\tilde{H}\tau} e^{-\tilde{H}_0\tau} A(\tau) e^{\tilde{H}_0\tau} e^{-\tilde{H}\tau} e^{\tilde{H}\tau'} e^{-\tilde{H}_0\tau'} B(\tau') e^{\tilde{H}_0\tau'} e^{-\tilde{H}_0\tau'} \end{aligned} \quad (8.18)$$

Введем определение:

$$U(\tau, \tau') = e^{\bar{H}_0 \tau} e^{-\bar{H} \tau} e^{\bar{H} \tau'} e^{-\bar{H}_0 \tau'} \quad (8.19)$$

$$A_H(\tau) B_H(\tau') = U(0, \tau) A(\tau) U(\tau, \tau') B(\tau') U(\tau', 0) \quad (*) \quad (8.20)$$

Отметим свойства U-оператора, которые могут быть полезны в дальнейшем:

1.

$$U(\tau, \tau) = 1 \quad (8.21)$$

2.

$$U(\tau, \tau') U(\tau', \tau'') = U(\tau, \tau'') \quad (8.22)$$

Получим свойства вычисления U-операторов. Запишем уравнение, решением которого будет U-оператор.

$$\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau, \tau') = \bar{H}_0 U(\tau, \tau') - e^{\bar{H}_0 \tau} \bar{H} e^{-\bar{H}(\tau - \tau')} e^{-\bar{H}_0 \tau'} \quad (8.23)$$

$$\bar{H} = \bar{H}_0 + V \quad (8.24)$$

Тогда:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau, \tau') = -e^{\bar{H}_0 \tau} V e^{-\bar{H}(\tau - \tau')} e^{-\bar{H}_0 \tau'} = -V(\tau) U(\tau, \tau') \quad (8.25)$$

Получили дифференциальное уравнение. Проинтегрируем обе части в пределах от τ' до τ :

$$\int_{\tau'}^{\tau} \frac{\partial}{\partial \tau_1} U(\tau_1, \tau') d\tau_1 = U(\tau, \tau') - U(\tau', \tau') = - \int_{\tau'}^{\tau} V(\tau_1) U(\tau_1, \tau') d\tau_1 \quad (8.26)$$

Введенный оператор должен удовлетворять выражению:

$$U(\tau, \tau') = 1 - \int_{\tau'}^{\tau} V(\tau_1) U(\tau_1, \tau') d\tau_1 \quad (8.27)$$

Уравнение решается методом итераций.

$$\begin{aligned} U(\tau, \tau') &= 1 - \int_{\tau'}^{\tau} V(\tau_1) d\tau_1 + \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 V(\tau_1) \int_{\tau'}^{\tau_1} V(\tau_2) U(\tau_2, \tau') d\tau_2 = \\ &= 1 - \int_{\tau'}^{\tau} V(\tau_1) d\tau_1 + \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 V(\tau_1) \int_{\tau'}^{\tau_1} V(\tau_2) d\tau_2 - \end{aligned} \quad (8.28)$$

$$- \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 V(\tau_1) \int_{\tau'}^{\tau_1} d\tau_2 V(\tau_2) \int_{\tau'}^{\tau_2} d\tau_3 V(\tau_3) + \dots$$

Рассмотрим соотношение отдельно:

$$\begin{aligned} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau_1} d\tau_2 V(\tau_1) V(\tau_2) &= \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_2 \theta(\tau_1 - \tau_2) V(\tau_1) V(\tau_2) = \\ &= \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_2 \theta(\tau_2 - \tau_1) V(\tau_2) V(\tau_1) \end{aligned} \quad (8.29)$$

Учли, что

$$\tau' \leq \tau_2 \leq \tau_1 \quad (8.30)$$

Вспомним, что:

$$TV(\tau_1)V(\tau_2) = \theta(\tau_1 - \tau_2)V(\tau_1)V(\tau_2) + \theta(\tau_2 - \tau_1)V(\tau_2)V(\tau_1) \quad (8.31)$$

Таким образом,

$$\frac{1}{2} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_2 TV(\tau_1)V(\tau_2) \quad (8.32)$$

Для большего числа операторов можно записать:

$$\frac{1}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \dots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_n TV(\tau_1) \dots V(\tau_n) \quad (8.33)$$

Тогда в общем смысле за счет $\frac{1}{n!}$ получается конструкция, напоминающая экспоненту.

$$U(\tau, \tau') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \dots d\tau_n TV(\tau_1) \dots V(\tau_n) \equiv T \exp - \int_{\tau'}^{\tau} V(\tau_1) \quad (8.34)$$

Функция Грина через U-оператор

Рассмотрим положительные мнимые времена.

$$G(k, \tau) = - \langle Ta_{kH}(\tau) a_k^+(0) \rangle \quad (8.35)$$

Раскроем среднее:

$$G(k, \tau) = - \frac{1}{Z} Tr[e^{-\beta \bar{H}} Ta_{kH}(\tau) a_k^+(0)] = - \frac{1}{Z} Tr[e^{-\beta \bar{H}_0} e^{\beta \bar{H}_0} e^{-\beta \bar{H}} Ta_{kH}(\tau) a_k^+(0)] =$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}_0} U(\beta, 0) U(0, \tau) a_k(\tau) U(\tau, 0) a_k^+(0)] = \\
 &= -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}_0} U(\beta, \tau) a_k(\tau) U(\tau, 0) a_k^+(0)] = -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}_0} T U(\beta, 0) a_k(\tau) a_k^+(0)] \quad (8.36)
 \end{aligned}$$

Для отрицательных τ результат будет такой же. Для любого времени результат выполняется:

$$G(k, \tau) = -\frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}_0} T U(\beta, 0) a_k(\tau) a_k^+(0)] = -\frac{\text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}_0} T U(\beta, 0) a_k(\tau) a_k^+(0)]}{\text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}_0} U(\beta, 0)]} \quad (8.37)$$

Определим:

$$\langle \star \rangle_0 \equiv \frac{\text{Tr}[e^{-\beta\bar{H}_0} \star]}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}} \quad (8.38)$$

Приходим к выводу, что функция Грина мнимого времени:

$$G(k, \tau) = -\frac{\langle T U(\beta, 0) a_k(\tau) a_k^+(0) \rangle}{\langle U(\beta, 0) \rangle_0} = -\frac{\langle T a_k(\tau) a_k^+(0) U(\beta, 0) \rangle_0}{\langle U(\beta, 0) \rangle_0} \quad (8.39)$$

Среднее по не взаимодействующей системе

Обсудим среднее по не взаимодействующей системе. Введем спаривание:

$$\widehat{AB} = \langle TAB \rangle_0 = \frac{\text{Tr} e^{-\beta\bar{H}_0} TAB}{\text{Tr} e^{-\beta\bar{H}_0}}$$

Обработаем произведение двух операторов:

$$a_k(\tau) \widehat{a_k^+(0)} = \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \rangle_0 = -G(k, \tau)$$

Очевидно, что

$$a_k(\tau) \widehat{a_{k'}(0)} = 0$$

Нужно соблюдать, что операторы рождения и уничтожения должны быть скомпенсированы.

Более интересно, когда есть не 2, а 4 перемножаемых оператора:

$$\langle T a_k(\tau) a_k^+(0) a_{k'}^+(\tau_k) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 \quad (8.42)$$

Теорема Вика утверждает, что при анализе средних значений для четного числа перемножаемых операторов необходимо учитывать все возможные спаривания этих операторов. При этом знак, соответствующий каждому спариванию, определяется

на основании коммутационных соотношений между объединяемыми операторами. Кроме того, каждое отдельное спаривание следует рассматривать в контексте независимых произведений.

$$\begin{aligned} & \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) a_{k'}^+(\tau_k) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 = \\ & = a_k(\tau) a_k^+(0) a_{k'}^+(\tau_1) a_{k'}(\tau_1) + a_k(\tau) a_k^+(0) a_{k'}^+(\tau_1) a_{k'}(\tau_1) \end{aligned} \quad (8.43)$$

Объединим сначала соседние, потом через одно слагаемое.

$$\begin{aligned} & \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) a_{k'}^+(\tau_k) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 = \\ & = \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \rangle_0 \langle T a_{k'}^+(\tau_1) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 - \langle T a_k(\tau) a_{k'}^+(\tau_1) \rangle_0 \langle a_k^+(0) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 \end{aligned} \quad (8.44)$$

$$\langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \rangle_0 = -G_0(k, \tau) \quad (8.45)$$

$$\begin{aligned} & \langle T a_{k'}^+(\tau_1^+) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 = \langle a_{k'}^+(\tau_1^+) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 = \\ & = - \langle T a_{k'}(\tau_1) a_{k'}^+(\tau_1^+) \rangle_0 = G_0(k', 0^-) \end{aligned} \quad (8.46)$$

$a_{k'}^+(\tau_1^+)$ – немного более поздний оператор, чем $a_{k'}(\tau_1)$. Учтем, что

$$\tau > \tau_1 \quad (8.47)$$

Тогда

$$\langle T a_k(\tau) a_{k'}(\tau_1) \rangle_0 = -G_0(k, \tau - \tau_1) \delta_{kk'} \quad (8.48)$$

Аналогично и во втором случае, однако там нужна перемена мест, из-за чего возникнет знак «минус».

Функция Грина в первом порядке теории возмущений

Системы с взаимодействием

На лекции будут введены диаграммы Фейнмана. Сформулируем правила, связанные с диаграммами Фейнмана. Это станет возможным после детального рассмотрения U -оператора, который играет роль оператора эволюции в терминах обычной квантовой механики. Получили выражение в виде:

$$U(\tau, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\tau} d\tau_1 \dots d\tau_n T \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \quad (9.1)$$

Количество времен соответствует порядку разложения.

Используя этот оператор можно найти представление для функции Грина. Было получено выражение для функции Грина в мнимом времени:

$$G(k, \tau) = - \frac{\langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}, \quad (9.2)$$

Среднее здесь – это среднее по идеальной системе. k – волновой вектор и проекция спина, «четверка».

Здесь обозначение $\langle \cdot \rangle_0$ означает:

$$\langle \cdot \rangle_0 = \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H_0} \cdot]}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}} \quad (9.3)$$

В экспоненте содержится гамильтониан для идеальной невзаимодействующей системы. Все операторы выписаны в представлении взаимодействия. Нужно уметь вычислять произвольные средние. В качестве примера рассматривалось так называемое спаривание: $\widehat{AB} = \langle TAB \rangle_0$.

Для функции Грина идеальной системы: $a_k(\tau) a_k^+(0) = -G_0(k, \tau)$

По теореме Вика можно вычислить более сложные выражения. Доказательство этой теоремы можно найти в литературе.

Функция Грина в первом порядке теории возмущений

Сформулируем правила Фейнмана. Введем графические элементы на примере первого порядка теории возмущений. Рассмотрим систему с взаимодействием. Кон-

струкция для потенциальной энергии имеет следующий вид:

$$\hat{V}(\tau) = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}, \vec{k}_1, \sigma_1, \vec{k}_2, \sigma_2} v_{\vec{q}} a_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma_1}^+(\tau) a_{\vec{k}-\vec{q}, \sigma_2}^+(\tau) \cdot a_{\vec{k}_2, \sigma_2}(\tau) a_{\vec{k}_1, \sigma_1}(\tau) \quad (9.4)$$

\vec{q} – волновой вектор, который переносится при взаимодействии. Эта конструкция соответствует схеме взаимодействия (еще не диаграмма Фейнмана). Поток волнового вектора обозначается пунктиром.

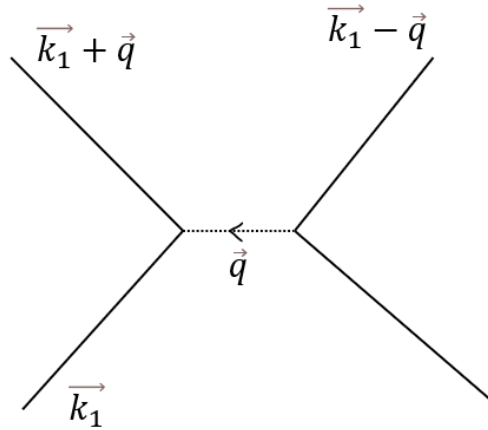


Рис. 9.1. Схема взаимодействия

Вклад в нулевом порядке $n = 0$:

$$G_0(\vec{k}, \tau) = -\langle T a_{\vec{k}\sigma}(\tau) a_{\vec{k}\sigma}^+(0) \rangle_0 \quad (9.5)$$

Первый элемент диаграммы – линия, входящая в точку, он символизирует рождение частицы в этой точке.

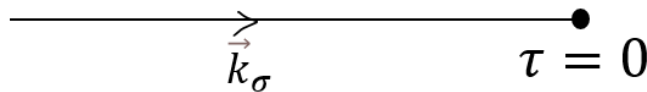


Рис. 9.2. Элемент диаграммы (оператор рождения)

Аналогично для оператора уничтожения. Линия исходит из точки, тогда символически это можно обозначить как оператор уничтожения.

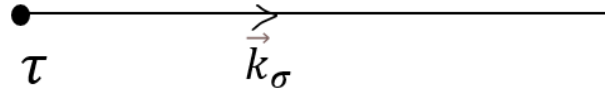


Рис. 9.3. Элемент диаграммы (оператор уничтожения)

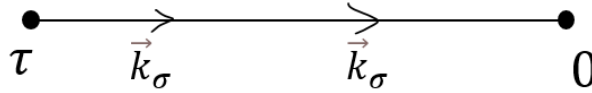


Рис. 9.4. Элемент диаграммы, соответствующий функции Грина

Две стрелки удобны для дальнейшего анализа, требуется закон сохранения. Необходимо добавить вершины взаимодействия. Для этого нужно подключить первый порядок. Посмотрим, как меняется запись. Сконцентрируемся на втором слагаемом $U(\tau, 0)$.

Для вклада, которого не было в нулевом порядке, можно записать конструкцию:

$$\int_0^\beta d\tau_1 \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}, \vec{k}_1, \sigma_1, \vec{k}_2, \sigma_2} v_{\vec{q}} \langle T a_{\vec{k}\sigma}(\tau) a_{\vec{k}\sigma}^+(0) a_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma_1}^+(\tau_1) a_{\vec{k}_2-\vec{q}, \sigma_2}^+(\tau_1) a_{\vec{k}_2, \sigma_2}(\tau_1) a_{\vec{k}_1, \sigma_1}(\tau_1) \rangle_0 \quad (9.6)$$

$$n = 1 \quad (9.7)$$

Посмотрим, какие линии можно извлечь. Линии происходят из спаривания. Нужно вспомнить теорему Вика. Будем брать спаривание по различным членам.

$$\langle TAB^+C^+D^+EF \rangle = \quad (9.8)$$

$$= AB^+C^+D^+EF + AB^+C^+D^+EF(1) + AB^+C^+D^+EF + AB^+C^+D^+EF + AB^+C^+D^+EF(1) + G_0(\vec{k}\sigma, \tau) G_0(\vec{k}_2\sigma_2, 0) G_0(\vec{k}_1\sigma_1, 0) \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_1+\vec{q}} \quad (9.9)$$

Смен знаков всего четное количество, значит получаем в итоге знак плюс.

$$G = -\langle aa^+ \rangle \quad (9.10)$$

Обсудим второй вклад:

$$(2) - G_0(k, \tau) G_0(k_1, 0) G_0(k_2, 0) \delta_{\vec{q}, \vec{0}} \quad (9.11)$$

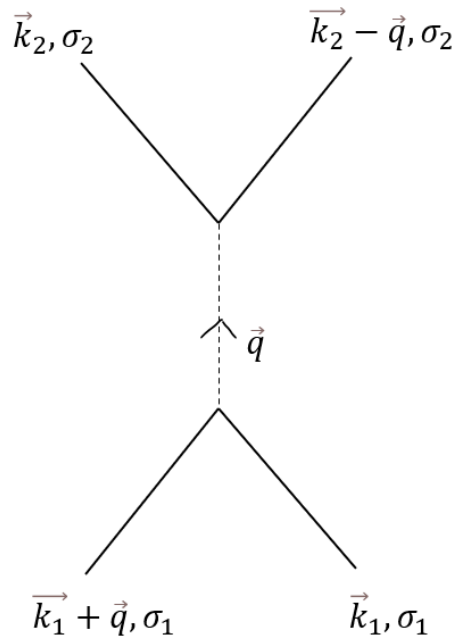


Рис. 9.5. Составная диаграмма

Третий вклад:

$$(3) - G_0(k, \tau - \tau_1) G_0(k, \tau_1) G_0(k_1, 0) \delta_{\vec{k}, \vec{k}_1 + \vec{q}} \delta_{\sigma\sigma_1} \delta_{\sigma\sigma_2} \delta_{\vec{k}k_2} \quad (9.12)$$

Четвертый вклад:

$$(4) + G_0(k, \tau - \tau_1) \delta_{\vec{k}, \vec{k} + \vec{q}} \delta_{\sigma\sigma_1} G_0(k, \tau_1) \delta_{\vec{k}k_1} G_0(k_2, 0) \quad (9.13)$$

Пятый вклад:

$$(5) + G_0(k, \tau - \tau_1) \delta_{\vec{k}, \vec{k}_2 - \vec{q}} \delta_{\sigma\sigma_2} G_0(k, \tau_1) \delta_{\vec{k}k_2} G_0(k_1, 0) \quad (9.14)$$

Шестой вклад:

$$(6) - G_0(k, \tau - \tau_1) \delta_{\vec{k}, \vec{k}_2 - \vec{q}} \delta_{\sigma\sigma_2} G_0(k, \tau_1) \delta_{\vec{k}k_1} \delta_{\sigma\sigma_1} G_0(k_2, 0) \quad (9.15)$$

Диаграммная техника нужна для более простого составления.

Зарисуем комбинации, учитывая, что любая диаграмма содержит три линии. Вдоль любой линии сохраняется волновой вектор и спин. Знак определяется рассмотрением вида диаграммы.

Видно, что оба закона удовлетворены. Текущий процесс также сохраняется: входная линия перетекает в выходящую. Нужно соблюдать направление линий.

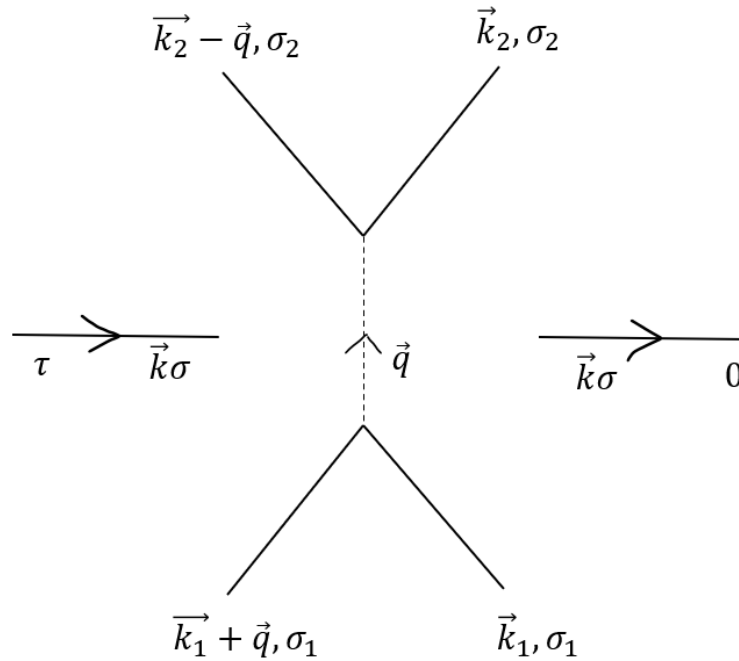


Рис. 9.6. Графическое описание. $\tau = 0$: создается \vec{k}, σ , τ : уничтожаются \vec{k}, σ , τ_1 :
 уничтожаются $\vec{k}_1, \sigma_1, \vec{k}_2, \sigma_2$, создаются $\vec{k} - \vec{q}, \sigma_2, \vec{k}_1 + \vec{q}, \sigma_1$

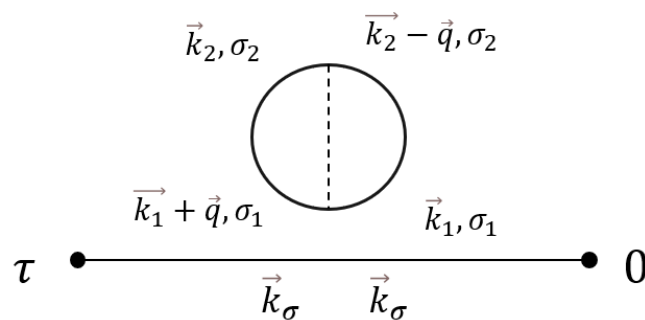


Рис. 9.7. Диаграмма для второго слагаемого

Нарисуем второй вклад. Используем объединение ветвей. Нужно добиться, чтобы при нулевом q k перетекало в $k - q$.

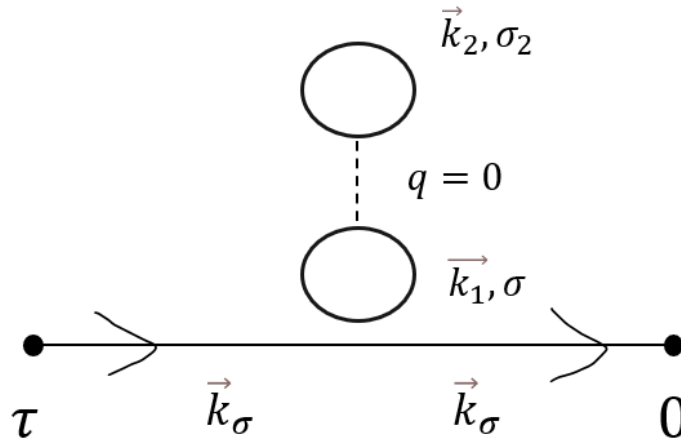


Рис. 9.8. Диаграмма для второго слагаемого

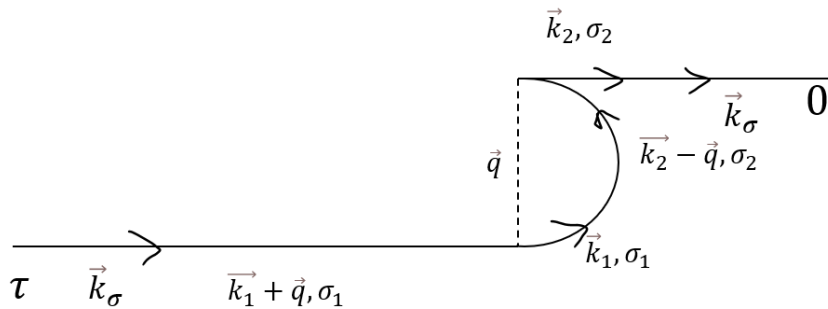


Рис. 9.9. Диаграмма для третьего слагаемого

Попробуем автоматизировать рисование таких диаграмм. Рассмотрим сокращение несвязанных диаграмм, когда можно выделить куски, в которых нет различий. Посмотрим, вносят ли они вклад в функцию Грина.

Сокращение несвязных диаграмм

В выражении, учитывающем нулевой и первый порядки:

$$G(k, \tau) = \frac{G_0(k, \tau) \int_0^\beta d\tau_1 \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \hat{V}(\tau_1) \rangle_0}{1 - \int_0^\beta d\tau_1 \langle T \hat{V}(\tau_1) \rangle_0} \quad (9.16)$$

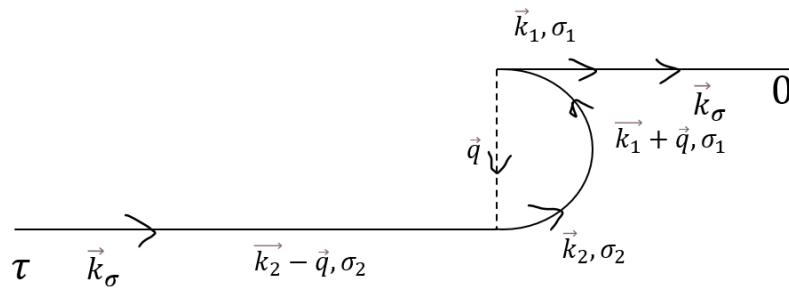


Рис. 9.10. Диаграмма для четвертого слагаемого (шестая по нумерации выше)

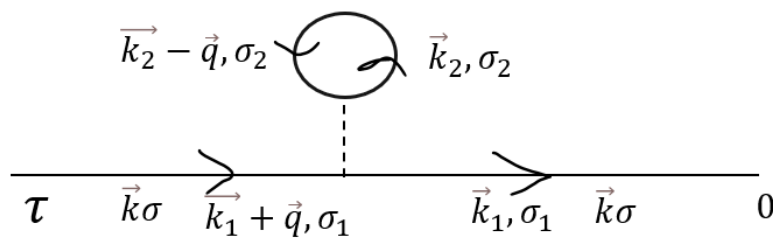


Рис. 9.11. Диаграмма для пятого слагаемого

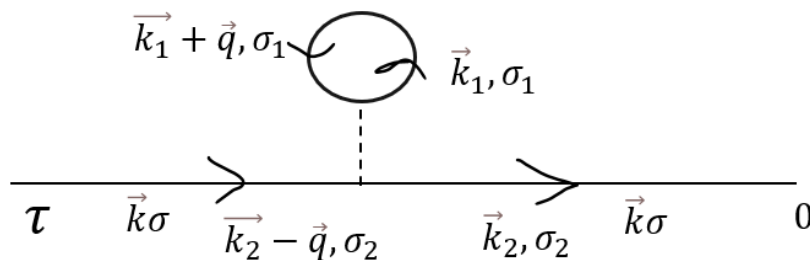


Рис. 9.12. Диаграмма для шестого слагаемого

Несвязные диаграммы можно записать следующим образом:

$$\frac{1}{2V} \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{q}\vec{k}\sigma_1\vec{k}_2\sigma_2} v_{\vec{q}} \langle Ta_k(\tau) a_k^+(0) a_{k_1+\vec{q},\sigma_1}^+ a_{k_1-\vec{q},\sigma_2}^+ a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1} \rangle_0 = \quad (9.17)$$

Можно выделить среди шести слагаемых те слагаемые, которые содержат спаривание между четырьмя операторами. Запишем в виде:

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2V} \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{q}\vec{k}\sigma_1\vec{k}_2\sigma_2} v_{\vec{q}} \langle Ta_k(\tau) a_k^+(0) \rangle_0 \left(-\langle Ta_{k_1+\vec{q},\sigma_1}^+ a_{k_2} \sigma_2 \rangle_0 \langle Ta_{k_2-\vec{q},\sigma_2}^+ a_{k_1\sigma_1} \rangle_0 + \right. \\ &+ \left. \langle Ta_{k_1+\vec{q},\sigma_1}^+ a_{k_1\sigma_1} \rangle_0 \langle Ta_{k_2-\vec{q},\sigma_2}^+ a_{k_1\sigma_1} \rangle_0 \right) + \dots = \\ &= \frac{1}{2V} \int_0^\beta d\tau_1 \sum_{\vec{q}\vec{k}\sigma_1\vec{k}_2\sigma_2} v_{\vec{q}} (-G_0(k, \tau)) \langle Ta_{k_1+\vec{q},\sigma_1}^+ a_{k_2-\vec{q},\sigma_2}^+ a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1} \rangle_0 + \dots \\ &\quad \langle Ta_{k_1+\vec{q},\sigma_1}^+ a_{k_2-\vec{q},\sigma_2}^+ a_{k_2\sigma_2} a_{k_1\sigma_1} \rangle = \hat{V}(\tau_1) \end{aligned} \quad (9.18)$$

Таким образом можно записать:

$$\begin{aligned} G(k, \tau) &= \frac{G_0(k, \tau) \int_0^\beta d\tau_1 \langle Ta_k(\tau) a_k^+(0) \hat{V}(\tau_1) \rangle_0}{1 - \int_0^\beta d\tau_1 \langle T\hat{V}(\tau_1) \rangle_0} = \\ &= \frac{G_0(k, \tau) (1 - I) + \text{связ. диагр.}}{1 - I} = \\ &= G_0(k, \tau) + \text{связ. диагр.}(1) (1 + I(1) + I^2(1) + \dots) = \\ &= G_0(k, \tau) + \text{связ. диагр.}(1) \end{aligned} \quad (9.20)$$

I соответствует первому порядку разложения. Здесь использовали $1/(1 - I(1)) = 1 + I(1) + I^2(1) + \dots$

Получилось, что только связные диаграммы вносят вклад в функцию Грина.

Упростим полученные четыре конструкции.

Топологически различные диаграммы

Сравним нарисованные конструкции.

В пятом вкладе движение по часовой стрелке. A – самый левый оператор уничтожения, исходящий из максимального времени, B – оператор рождения во время

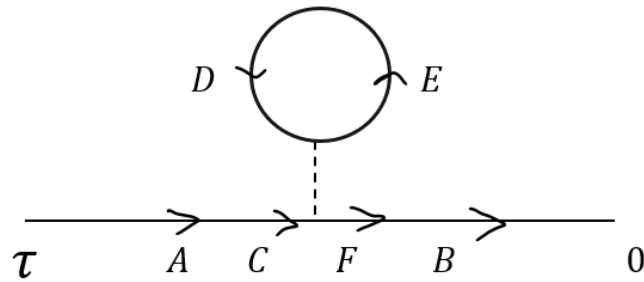


Рис. 9.13. Диаграмма, соответствующая $\langle TABCDEF \rangle$, четвертый вклад из шести рассмотренных

0. Местами относительно горизонтали меняются DCTF. То есть, кусочек заменяется зеркальным отражением. Различные подписи нивелируются тем, что в расчете вклада в функцию Грина есть суммирование по внутренним переменным, которые не замечают замены обозначений.

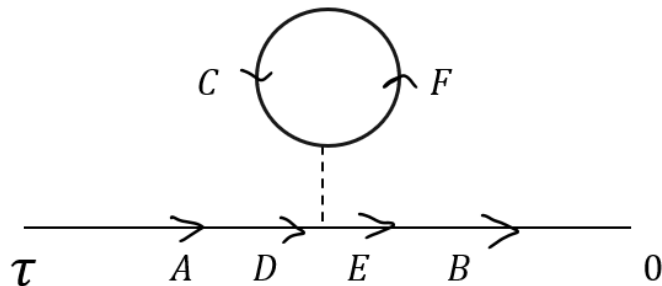


Рис. 9.14. Пятый вклад

Аналогично можно рассудить и для других диаграмм. Нарисуем одинаковые геометрические образы.

Поменялись местами CF и DE, меняем местами вершины.

Видим, что есть возможность каждую диаграмму можно обчислить один раз и умножить на количество комбинаций, которые соответствуют сменам вершин. Всего таких комбинаций 2^n (количество дублирований одинаковых образов). Так и появляются пары.

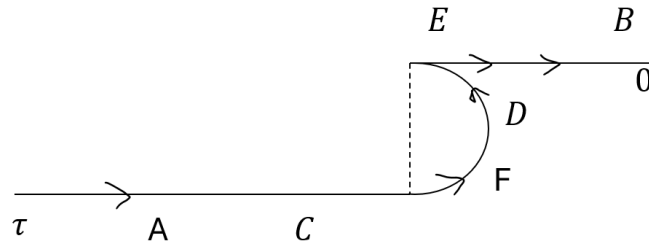


Рис. 9.15. Один из вкладов

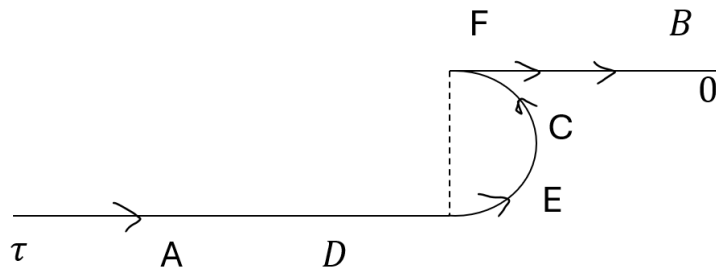


Рис. 9.16. Зеркальный вид предыдущего вклада

При расчете функции Грина имеет место интегрирование по временам:

$$\int d\tau_1 \dots \int d\tau_n \quad (9.21)$$

В таком случае число перестановок равняется $n!$. Можно избавиться от лишних перечислений.

$$\langle T a a^+ V_1 V_2 \dots V_n \rangle \quad (9.22)$$

$$C(n) = C_{tot} - \sum_{m=1}^n C_m^m C_{isol}(m) C(n-m) = (2n+1)! - \sum_{m=1}^n C_n^m (2m)! C(n-m) \quad (9.23)$$

Если посчитать конструкцию явно, то есть получить количество связанных диаграмм:

$$C_{\text{ТД}}(n) = \frac{C(n)}{n! 2^n} \quad (9.24)$$

$$C_{\text{ТД}}(1) = 2 \quad (9.25)$$

$$C_{\text{ТД}}(2) = 10 \quad (9.26)$$

$$C_{\text{ТД}}(3) = 74 \quad (9.27)$$

$$C_{\text{ТД}}(4) = 706 \quad (9.28)$$

$$C_{\text{ТД}}(5) = 8162 \quad (9.29)$$

Правило Фейнмана и примеры его применения

Функция Грина в первом порядке теории возмущений.

Продолжение

В первом порядке теории возмущений вклад вносят только связанные диаграммы, они состоят из линий. Две несвязанные диаграммы не учли в своем описании, остальные четыре диаграммы различаются перестановкой обозначений. Число расчетов можно уменьшить, оставив лишь топологически различные диаграммы, поскольку существует дублирование, обусловленное перестановками линий. Элемент функции Грина определяется интегрированием по временам, при этом число возможных перестановок линий составляет $n!$. Также вершины могут переставляться независимо в каждой ветви, что приводит к 2^n комбинациям.

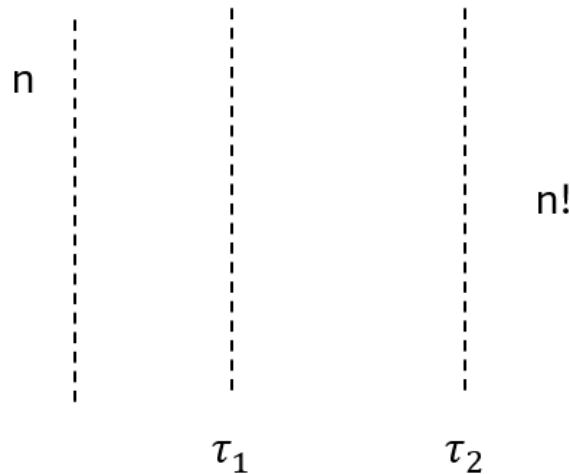


Рис. 10.1.

Сформулируем правило Фейнмана, которое позволит перейти к аналитическим выражениям.

Правило Фейнмана

В n -ом порядке запишем:

$$\delta G^{(n)}(k, \tau) = -\frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_n \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \rangle_{0,c} \quad (10.1)$$

Индекс означает «connected». Связанные диаграммы учитываются при спаривании. Многие перестановки можно не учитывать, уберем перестановки временных слоев. Это позволит не рассчитывать $n!$ интегралов.

а. Учтем дублирование за счет перестановок τ : убираем $n!$

за счет перестановок вершин

$$\left(\frac{v_q}{2V}\right)^n \longrightarrow \left(\frac{v_q}{V}\right) \quad (10.2)$$

б. Определим знак вклада, соответствующего диаграмме. Следует рассмотреть типичный матричный элемент, который получается путем раскрытия T -произведения:

$$\begin{aligned} M &= - \langle T a_k(\tau) a_k(0) a_1^+ a_1^+ a_{1'} a_{1'} \dots a_n^+ a_n^+ a_{n'} a_{n'} \rangle_{0,c} = \\ &= - \langle T a_k(\tau) a_1^+ a_1 a_1 a_{1'}^+ a_{1'} \dots a_n^+ a_n a_n^+ a_{n'} a_{n'}^+ \rangle_{0,c} \end{aligned} \quad (10.3)$$

При перестановке пар операторов знак не меняется. Рассмотрим одно из произведений (одна из диаграмм) будет иметь вид:

$$a_k(\tau) a_1^+ a_1 a_{1'}^+ \dots a_n a_n^+ a_{n'} a_{n'}^+ (0) \quad (10.4)$$

Все остальные вклады получают путем перестановки. Нужно переставлять именно пары операторов, при этом знак не меняется. Такая ситуация – это диаграмма без циклов. Смены знака при этом не происходит.

Создадим специально одну петлю: начнем с некоего оператора и закончим им.

$$\begin{aligned} M &= - \langle T a_k(\tau) a_k^+(0) a_1^+ a_1^+ a_{1'} a_{1'} \dots a_n^+ a_n a_n^+ a_k^+(0) \rangle_{0,c} = \\ &= \langle T a_k(\tau) a_1^+ a_{1'} a_{1'}^+ a_1 \dots a_n^+ a_n a_n^+ a_{n'} a_{n'}^+ \rangle_{0,c} \end{aligned} \quad (10.5)$$

Один из полученных вкладов будет иметь вид:

$$a_k(\tau) a_1^+ a_{1'} a_{1'}^+ a_1 a_2^+ \dots a_n a_k^+(0) \quad (10.6)$$

Графически это будет выглядеть как петля, один цикл. Появление такого цикла связано с изменением знака с минуса на плюс. Это простейшая ситуация, можно переставить операторы a_1 и a_2 .

Пример – более длинный цикл.

$$a_2 a_{1'}^+ a_{1'} a_2^+ a_1 a_2^+ \quad (10.7)$$

Каждое появление цикла сопряжено со сменой знака. Получили два оператора в одно и то же время, нужно доопределить выражение вида:

$$a_{k'}^+(\tau_1) a_{k''}(\tau_1) = a_{k'}^+(\tau_1 + 0) a_{k''}(\tau_1) = \langle T a_{k'}^+(\tau_1^+) a_{k''}(\tau_1) \rangle_{0,c} =$$

$$= - \langle T a_{k''}(\tau_1) a_{k'}^+(\tau_1^+) \rangle_0 = \delta_{k',k''} G_0(k', 0^-) \quad (10.8)$$

Здесь учтено, что

$$0^- = -0^+ \quad (10.9)$$

в. Применим Фурье-преобразование к возникающим конструкциям для удобства вычисления.

$$G_0(k', 0^-) = \frac{1}{\beta} \sum_n G_0(k', \omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \quad (10.10)$$

$$\omega_n = \frac{\pi}{\beta} (2n + 1) \quad (10.11)$$

Аналогичным образом перейдем в Фурье-представление для линий взаимодействия. г. Получим закон сохранения ω в вершинах. Нарисуем элемент диаграммы. Нужно заменить все нарисованные линии на их Фурье-образ.

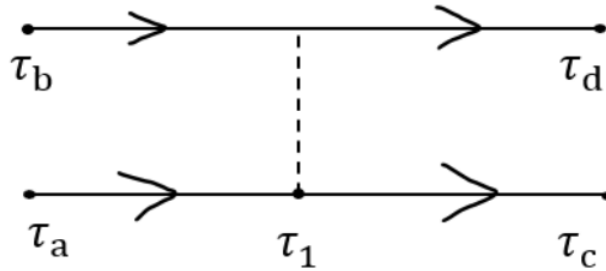


Рис. 10.2. Закон сохранения в вершинах

$$G_0(\tau_2 - \tau_1) = \frac{1}{\beta} \sum_{n_1} G_0(\omega_{n_1}) e^{-i\omega_{n_1}(\tau_2 - \tau_1)} \quad (10.12)$$

$$G_0(\tau_1 - \tau_c) = \frac{1}{\beta} \sum_{n_3} G_0(\omega_{n_3}) e^{-i\omega_{n_3}(\tau_1 - \tau_c)} \quad (10.13)$$

Учтем, что имеет место интегрирование. Под интегралом содержится произведение всех функций Грина, нас будет интересовать четыре функции Грина, каждая из которых имеет экспоненту от разности времен. Условно можно записать так:

$$\int_0^\beta d\tau_1 G_0 G_0 G_0 G_0 \quad (10.14)$$

Раскроем это произведение:

$$\int_0^\beta d\tau_1 e^{i(\omega_{n_1} + \omega_{n_2} - \omega_{n_3} - \omega_{n_4})\tau_1} = \beta \delta_{\omega_{n_1} + \omega_{n_2}, \omega_{n_3} + \omega_{n_4}} \quad (10.15)$$

Первая частота идет со знаком плюс. Входящие линии привносят положительную частоту. То есть, в нашей ситуации две частоты положительные и две отрицательные (по числу входящих и выходящих линий). Сумма из четырех дискретных величин либо равна нулю (экспонента от нуля – единица, а интеграл дает β), либо не равна (тогда получаем осцилляции). С физической точки зрения это означает, что если направим перебегающую частоту от одной линии к другой, тогда

$$\omega_m = \omega_{n_1} - \omega_{n_3} = \omega_{n_4} - \omega_{n_2} \quad (10.16)$$

Получили дополнительный закон сохранения, который получился в следствие снятия интегрирования. Всего законов сохранения будет три, а не два, как было до сих пор.

д. Осталось посчитать коэффициент пропорциональности. Вспомним вклад в функцию Грина:

$$\delta G^{(n)}(k, \tau) = \pm \frac{(-1)^n}{n!} \int d\tau_1 d\tau_n \sum \left(\frac{v_q}{V}\right)^n G_0 \cdot G \quad (10.17)$$

Перечислим полученные результаты в виде рецепта.

1. Для создания диаграммы Фейнмана нужно нарисовать все связанные диаграммы, которые содержат n линий взаимодействия, тогда число фермионных линий должно получиться $2n + 1$.
2. Внешние линии (а их всего две штуки) имеют набор значений, характеристик: $(\vec{k}\sigma, \omega_n)$ б ω_n – пока некая техническая частота. Внутренние фермионные линии $(2n - 1)$ штук имеют свои промежуточные характеристики $\vec{k}_1, \sigma_1, \omega_{n_1}$. Линии взаимодействия имеют характеристики – ω_m, \vec{q}_1 . Спин не меняется, есть перенос частот и волновых векторов. В любой вершине выполнены законы сохранения.
3. Если внешние линии соответствуют функциям Грина $G_0(\vec{k}, \sigma, \omega_n)$, то внутренние линии соответствуют функциям Грина с нужными характеристиками $G_0(\vec{k}_1, \sigma_1, \omega_{n_1})$. Может быть необходимость умножения на некий фактор. После перемножения умножаем на $e^{i\omega_{n_1} 0^+}$ в двух ситуациях: замкнутая на себя фермионная линия (цикл), если фермионная линия концами соответствует линии взаимодействия (в качестве времени – разность времен) Один конец соотносится с оператором рождения, а дру-

гой – с оператором уничтожения, получается малая добавка. Сомножители обеспечивают сходимость, на них нужно аккуратно умножать.

4. Для линий взаимодействия нужно вставить множитель $\frac{v_{\vec{q}}}{V}$.

5. Просуммировать по всем промежуточным (они же внутренние) переменным: волновые вектора и спины в вершинах.

6. Общий множитель $\frac{(-1)^{n+F}}{\beta^n}$, F – количество замкнутых фермионных линий. Это можно показать явным подсчетом.

Осталось рассмотреть, как благодаря этим рецептам, можно составить аналитические выражения, соответствующие вкладам в функцию Грина.

Примеры применения правил Фейнмана

Рассмотрим первый порядок $n = 1$. Нужно следить за количеством линий взаимодействия, она имеет четыре хвоста. Четыре хвоста образуют цикл. Линия взаимодействия – линия между двумя вершинами. Нужно расставить внутренние переменные, которые будут только на петле. Внешние ставятся всегда одни и те же. Какой-то импульс мог бы улетать по линии, то есть, все, что может улетать – нулевое значение. С неизбежностью $\vec{q} \equiv 0$. Тогда только ω_m можно приписать этой линии. Справа приписывается произвольный набор (обозначаем штрихами). При переходе между линиями добавляется нулевой волновой вектор. Спин сохраняется в каждой точке. Укажем, что петля одна, то есть $F = 1$ (количество замкнутых циклом).

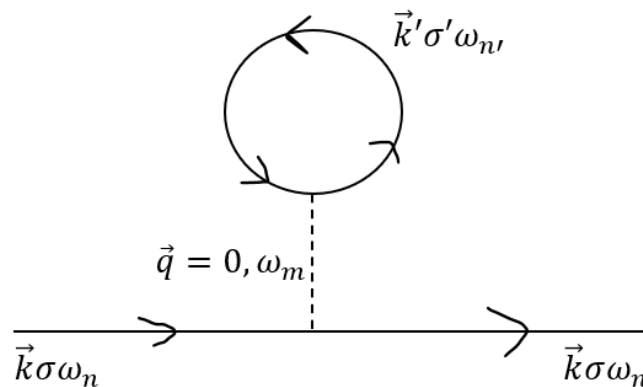


Рис. 10.3. Пример 1

Запишем вклад от диаграммы первого типа (в первом порядке теории возмущений). Аргументы – внешние переменные. Для каждой из линий необходимо поделить на β . Линия одна, поэтому в знаменателе β будет в первой степени.

$$\delta G_a^{(1)}(\vec{k}, \sigma, \omega_n) = \frac{(-1)^2 v_0}{\beta V} \left(G_0(\vec{k}, \sigma, \omega_n) \right)^2 \sum_{\vec{k}' \sigma'} \sum_{n'} G_0(\vec{k}', \sigma', \omega_{n'}) e^{i\omega_n 0^+} \quad (10.18)$$

Для каждой промежуточной линии взято умножение на фактор взаимодействия, в нашем случае волновой вектор не переносится, поэтому подставлен нулевой аргумент. Провели суммирование по трем внутренним степеням свободы. 0^+ – бесконечно малое положительное число.

Второй пример. Входящая линия снизу, а выходящая – сверху. Уточним необходимые характеристики. Удобно начинать с внешних аргументов. Внутренние переменные задаются так, чтобы они характеризовали линию взаимодействия. Изогнутая линия переносит избыток, который не попал в линию взаимодействия. То есть, нужно суммировать по всем переменным, в отличие от предыдущего примера. Нужно также учитывать различие между оператором рождения и оператором уничтожения.

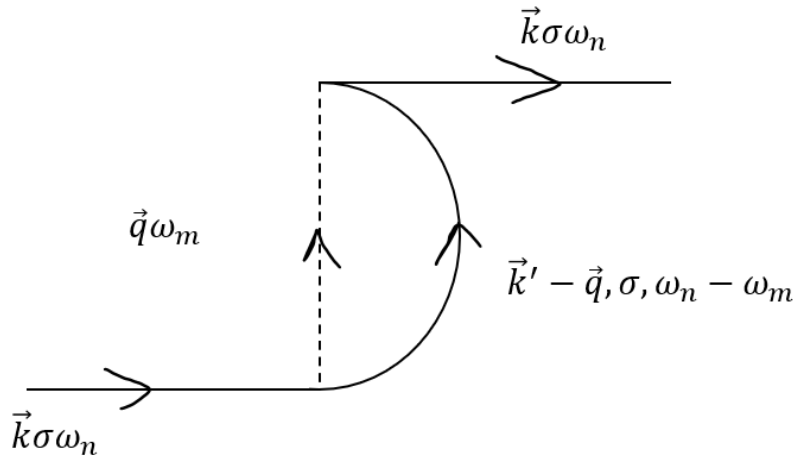


Рис. 10.4. Пример 2

Видно, что можно записать выражение:

$$\delta G_\delta^{(1)}(\vec{k}, \sigma, \omega_n) = \frac{(-1)^1}{\beta} \sum_{\vec{q}} \frac{v_0}{V} \left(G_0(\vec{k}, \sigma, \omega_n) \right)^2 \sum_m G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) e^{i(\omega_n - \omega_m) 0^+} \quad (10.19)$$

Рассмотрим пример диаграммы второго порядка. Нарисуем одну из десяти топологически различных диаграмм второго порядка. Линии взаимодействия с двух

боков, переносятся \vec{q}, ω_m . Внешняя линия входящая должна совпасть с внешней выходящей линией.

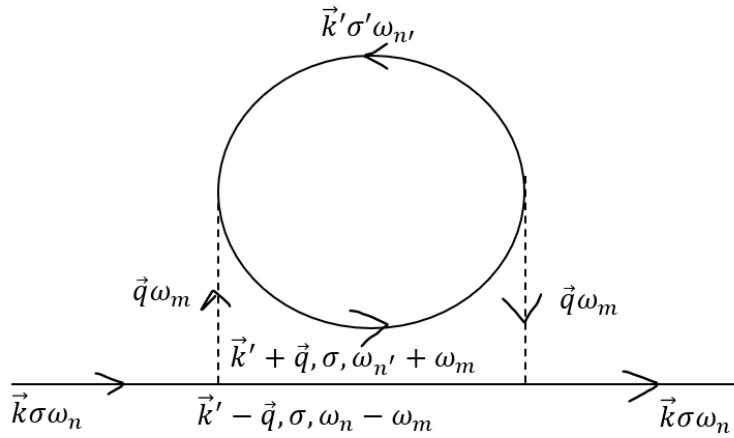


Рис. 10.5. Пример 3. Одна из десяти диаграмм второго порядка

Выражение в таком случае принимает более сложный вид:

$$\delta G_R^{(2)}(\vec{k}, \sigma, \omega_n) = \frac{(-1)^3}{\beta^2} \left(G_0(\vec{k}\sigma\omega) \right)^2 \sum_{\vec{q}, \omega_m} \left(\frac{vq}{V} \right)^2 \sum_{n', \vec{k}, \sigma'} G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_{n'}) \cdot G_0(\vec{k}', \sigma', \omega_{n'}) G_0(\vec{k}' + \vec{q}, \sigma', \omega_{n'} + \omega_m) \quad (10.20)$$

Выражение составлено вполне однозначно.

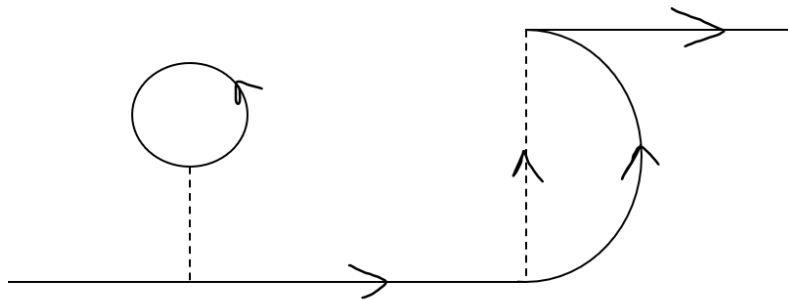


Рис. 10.6. Пример 4. Домашнее задание

Собственная энергия

Без расчета выражений можно прийти к наблюдаемым результатам. Следует посмотреть на диаграммы: всегда возникает множитель G_0^2 . Всегда возникает множи-

тель, который опирается на входящую и выходящую фермионную линию. Общий вид всех выражений:

$$G_0(k, \omega_n) B(k, \omega_n) G_0(k, \omega_n) \quad (10.21)$$

Можно независимо перебрать все внутренние части и подключить к ним хвосты. Пусть мы можем просуммировать все диаграммы без внешних линий во всех порядках теории возмущения. В таком случае можно записать выражение следующего вида:

$$G(k, \omega_n) = G_0(k, \omega_n) + G_0(k, \omega_n) \Sigma(k, \omega_n) G_0(k, \omega_n) \quad (10.22)$$

$G_0(k, \omega_n)$ – нулевой порядок; $G_0(k, \omega_n) \Sigma(k, \omega_n) G_0(k, \omega_n)$ – собраны все вклады от внутренних наполнений, Σ – собственная энергия частицы, смысл станет понятнее позже. Графически обозначается в диаграммной технике толстой линией. Между линиями зажата вся информация о системе.

Вертикальные линии в кружочке в диаграммной технике – это собственная энергия, она состоит из нескольких вкладов.

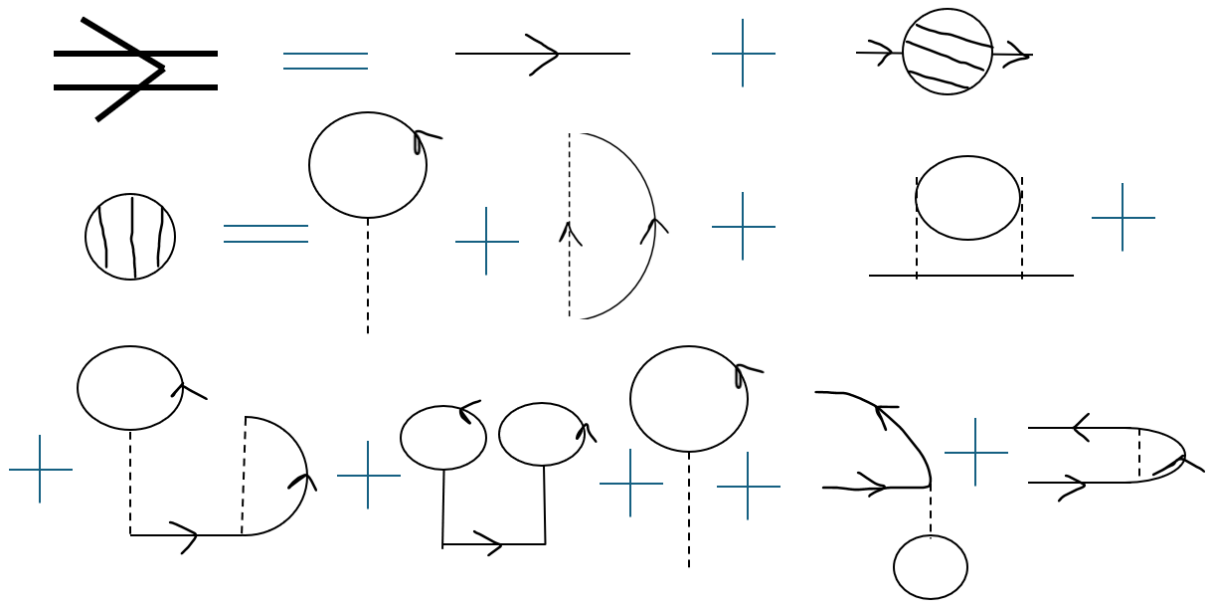


Рис. 10.7. Собственная энергия: графическое описание

Если заметить, что есть диаграммы двух видов, то задача упрощается. Диаграммы разделяются на приводимые и неприводимые (из КТП). Приводимые – результат расчета по неприводимым. Неприводимые диаграммы не могут быть представлены в виде «диаграмма – фермионная линия – диаграмма».

Тогда можно подробнее расписать функцию Σ :

$$\Sigma(k, \omega_n) = \Sigma^*(k, \omega_n) + \Sigma^+(k, \omega_n) G_0 \Sigma^* \quad (10.23)$$

Σ^* – сумма неприводимых. Проблема редуцирована до рассмотрения самых простых диаграмм. Благодаря таким определениям можно перейти к уравнению Даймона и

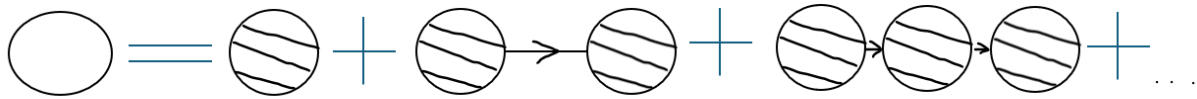


Рис. 10.8. Графическое представление. Первый кружок – собственная энергия возможности рассмотрения возбужденных состояний с изменением характеристики исходных состояний.

Электронный газ: первый и второй порядок теории возмущений

Функция Грина в первом порядке теории возмущений.

Продолжение

Мы сформулировали правила Фейнмана. После того как все необходимые диаграммы будут нарисованы, можно приступать к написанию, упрощению и преобразованию соответствующих выражений. Изменения в отдельных группах диаграмм происходят по определённым закономерностям. Например, функцию Грина можно представить следующим образом:

$$G(k, \omega_n) = G_0 + G_0 \Sigma G_0 \quad (11.1)$$

G_0 – идеальная невзаимодействующая система, единичный пропагатор. Остальные диаграммы могут быть просуммированы с образованием центрального вклада, если выбросить все начала и концы у каждой из диаграмм. Вставка Σ – собственная энергия. Если нарисовать диаграммы, входящие внутрь собственной энергии, то увидим некий класс неприводимых диаграмм. Вставляем одну фермионную линию между набором диаграмм.

$$\Sigma = \Sigma^* + \Sigma^* G_0 \Sigma^* + \Sigma^* G_0 \Sigma^* G_0 \Sigma^* \quad (11.2)$$

Все концы обрезаны. Если эту конструкцию подставить в функцию Грина, то получится рекуррентное соотношение:

$$\begin{aligned} G &= G_0 + G_0 \Sigma^* G_0 + G_0 \Sigma^* G_0 \Sigma^* G_0 + \dots = \\ &= G_0 + G_0 \Sigma^* (G_0 + G_0 \Sigma^* G_0 + \dots) = G_0 + G_0 \Sigma^* G \end{aligned} \quad (11.3)$$

G – полная функция Грина во всех взаимодействиях во всех порядках. Это уравнение носит название уравнение Дайсона. Уравнение имеет довольно очевидное решение. Получим явный вид:

$$G(k, \omega_n) = \frac{G_0(k, \omega_n)}{1 - G_0(k, \omega_n) \Sigma^*(k, \omega_n)} \quad (11.4)$$

Функция Грина находится через простейшую функцию Грина и через неприводимую часть собственной энергии. Некоторые выводы можно получить из общей концепции.

Рассмотрим, на что влияет включение взаимодействия. Вспомним рецепт перехода к запаздывающей функции Грина в терминах вещественного времени заключался в том, что:

$$G^R(k, \omega) = G(k, \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - \Sigma^{*R}(k, \omega)} \quad (11.5)$$

ω – непрерывная величина.

Уже дважды вычисляли и знаем, что

$$G_0(k, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k} \quad (11.6)$$

ε_k – энергия с учетом вычитания химического потенциала.

Проанализируем со спектральной точки зрения. Вспомним, что

$$G^R(k, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(k, \varepsilon)}{\omega - \varepsilon + i\eta} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \quad (11.7)$$

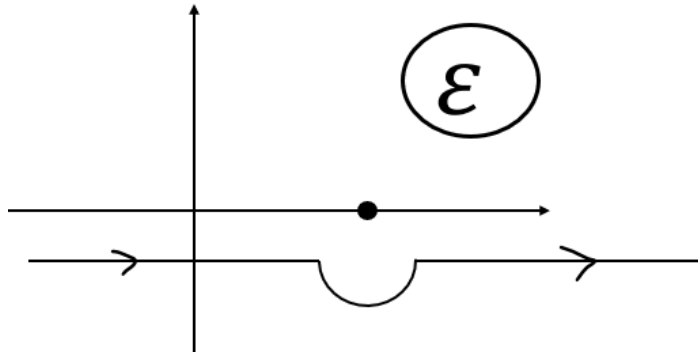


Рис. 11.1. Пространство ε

$A(k, \varepsilon)$ – функция спектральной плотности, показывает, сколько состояний с конкретным волновым вектором при данной энергии содержится. Оценим интеграл с помощью теоремы Сохоцкого-Племеля. Интеграл с полюсом на вещественной оси можно оценить:

$$G^R(k, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(k, \varepsilon)}{\omega - \varepsilon + i\eta} \frac{d\varepsilon}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(k, \varepsilon)}{\omega - \varepsilon} d\varepsilon - i\pi \frac{A(k, \omega)}{2\pi} \quad (11.8)$$

При взятии интеграла вдоль энергии, полюс оказывается в точке ω . Смещение полюса происходит вверх. Ось будем обходить по полуокружности снизу. Радиус можно устремить к нулю, получается интеграл в смысле главного значения. Из явного вида

можно показать, что функция спектральной плотности вещественная и неотрицательная. Мнимая часть слева:

$$\text{Im}G^R(k, \omega) = -\frac{1}{2}A(k, \omega) \quad (11.9)$$

При этом $A \in \mathbb{R}$.

$$A(k, \omega) = -2\text{Im}G^R(k, \omega) = \frac{-2\text{Im}\Sigma^{*R}}{(\omega - \varepsilon_k - \text{Re}\Sigma^{*R})^2 + (\text{Im}\Sigma^{*R})^2} \quad (11.10)$$

Из неотрицательности A следует:

$$\text{Im}\Sigma^{*R} \leq 0 \quad (11.11)$$

Вид известен – это кривая Лоренца. Пик можно найти из равенства:

$$\omega_0 - \varepsilon_k - \text{Re}\Sigma^{*R}(k, \omega_0) = 0 \quad (11.12)$$

$$\text{ширина} \sim -\text{Im}\Sigma^{*R}(k, \omega_n) \quad (11.13)$$

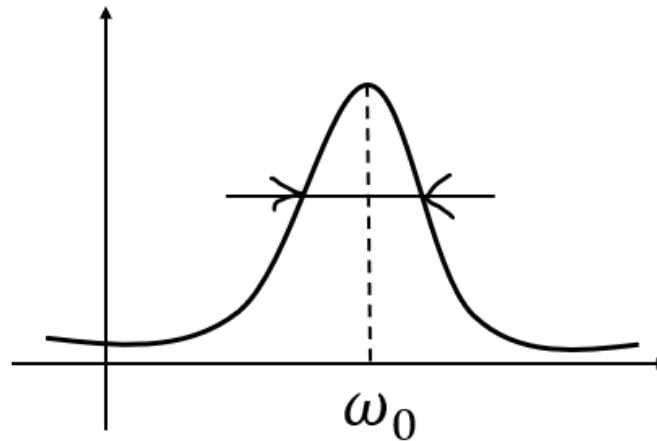


Рис. 11.2. Кривая Лоренца

Найдем временное представление. Для этого необходимо совершить обратное преобразование Фурье:

$$G^R(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(k, \omega) e^{-i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t} d\omega}{\omega \tilde{\omega}_k + i\gamma} \quad (11.14)$$

Здесь:

$$\tilde{\omega}_k = \varepsilon_k + \text{Re}\Sigma^{*R}(k, \varepsilon_k) \quad (11.15)$$

$$\gamma = -\text{Im}\Sigma^{*R}(k, \tilde{\omega}_k) \quad (11.16)$$

При $t > 0$: нижний полюс нужно обойти по часовой стрелке. При вычислении интеграла через вычеты получаем:

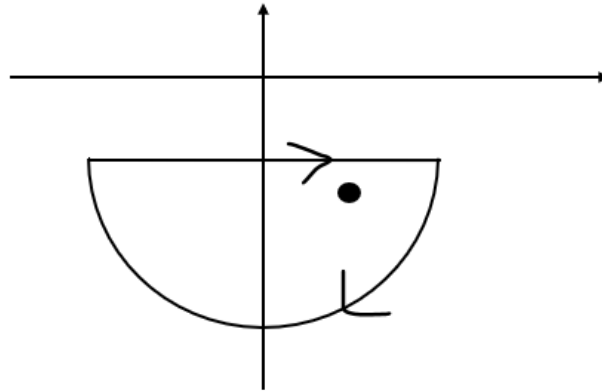


Рис. 11.3. Обход полюса по часовой стрелке

$$G^R(k, t) = \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) e^{-i\omega t} \Big|_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k - i\gamma} \cdot \theta(t) = -i\theta(t) e^{-i\tilde{\varepsilon}_k t} e^{-\gamma t} \quad (11.17)$$

Получили выражение для системы с взаимодействием. Сравним полученный результат с результатом для идеальной системы:

$$G_0^R(k, t) = -i\theta(t) e^{-i\varepsilon_k t} \quad (11.18)$$

В экспоненте энергия для идеальной системы. Уменьшающего фактора в данном случае нет. То есть, стационарное нахождение на некотором уровне. Таким образом, включение взаимодействия смещает энергию возбуждения, а также включает распад уровня. В связи с этим, вводится такая величина как среднее время жизни:

$$\tau = \frac{1}{2\gamma} = -\frac{1}{\text{Im}\Sigma^{*R}(k, \tilde{\varepsilon}_k)} \quad (11.19)$$

Результат получился достаточно общим.

Электронный газ

Вспомним гамильтониан, учитывающий наличие положительного фона кристаллической решетки:

$$\bar{H} = \sum_k (E_k - \mu) a_k^+ a_k + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}, q \neq 0} \sum_{\vec{k}_1, \sigma_1, \vec{k}_2, \sigma_2} \frac{4\pi e^2}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma_1}^+ a_{\vec{k}_2-\vec{q}, \sigma_2}^+ a_{\vec{k}_2, \sigma_2} a_{\vec{k}_1, \sigma_1} \quad (11.20)$$

$$v_{\vec{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad (11.21)$$

Первый порядок теории возмущений

Распишем неприводимую часть, связанную с собственной энергией в виде кольца и линии, опирающийся на линию взаимодействия:

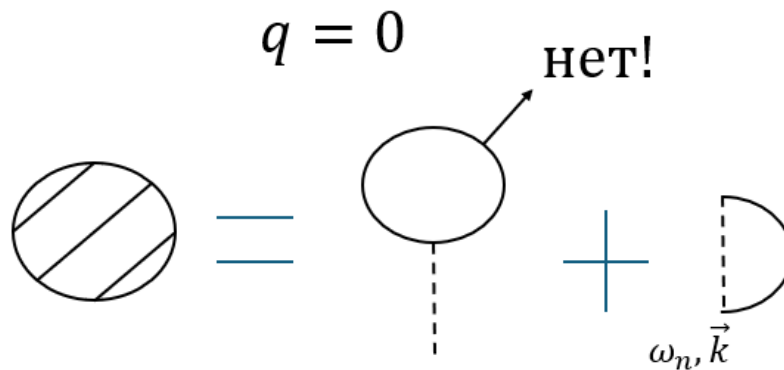


Рис. 11.4. Неприводимая часть

В сумме $q \neq 0$, поэтому первого вклада нет.

По правилам Фейнмана можно расписать:

$$\Sigma_1^*(k, \omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{q}, m} \frac{v_{\vec{q}}}{V} G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) \cdot e^{i(\omega_n - \omega_m)0^+} \quad (11.22)$$

Σ_1^* – первый порядок теории возмущений. V – объем. 0^+ – бесконечно малое положительное число. Внутренние характеристики, которые перетекают на рисунке по фермионной линии: \vec{q}, ω_n . Проведем суммирование по m . Для этого нужно сделать замену переменных. Введем обозначение:

$$\omega_{n'} = \omega_n - \omega_m \quad (11.23)$$

Тогда выражение принимает вид:

$$\Sigma_1^*(k, \omega_n) = -\frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} \sum_{n'} G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma \omega_{n'}) e^{i\omega_n' 0^+} \quad (11.24)$$

Из частотного переходим во временное представление:

$$\Sigma_1^*(k, \omega_n) = \frac{-1}{V} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, 0^-) \quad (11.25)$$

Найдем $G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, 0^-)$:

$$G_0(p, 0^-) = -\langle T a_p(0) a_p^+(0^+) \rangle = \langle a_p^+(0^+) a_p(0) \rangle = n_p = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_p} + 1} \quad (11.26)$$

Применили упорядочение по времени. Знак меняется из-за того, что операторы фермионные. Получили распределение Ферми-Дирака. Можно доказать это и без обращения к курсу статистической физики.

Подставим полученный результат:

$$\Sigma_1^*(k, \omega_n) = \frac{-1}{V} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} F(\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) \quad (11.27)$$

Такие функции дают вклады в наблюдаемые величины. Нужно проанализировать, что было получено, располагая представлением в первом порядке теории возмущений.

а. Рассмотрим $\Sigma_1^*(k, \omega_n)$ при нулевых температурах $\theta \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty$. Распределение стремится к ступеньке.

$$F \rightarrow \theta(k_F - |\vec{p}|) \quad (11.28)$$

Сумма может быть заменена на интеграл. Будем применять формулу Эйлера-Маклорена. Здесь можно увидеть отличающиеся от эксперимента свойства. Оценим неприводимую часть собственной энергии:

$$\begin{aligned} & -\frac{4\pi e^2}{V} \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{\theta(k_F - |\vec{p}|)}{|\vec{k} - \vec{p}|^2} d\vec{p} = -\frac{e^2}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} d\Phi \int_0^{\pi} \sin\Theta d\Theta \int_0^{k_F} \frac{p^2 dp}{|\vec{k} - \vec{p}|^2} = \\ & = -\frac{e^2}{\pi} \int_{-1}^1 du \int_0^{k_F} \frac{p^2 dp}{k^2 + p^2 - 2kpu} = -\frac{e^2}{\pi} \int_0^{k_F} p^2 dp \frac{1}{-2kp} \ln(|k^2 + p^2 - 2kpu|) \Big|_{-1}^1 = \\ & = \frac{e^2}{2\pi k} \int_0^{k_F} p dp \ln \frac{(k-p)^2}{(k+p)^2} = \frac{e^2 k_F^2}{\pi k} \int_0^1 x \ln \frac{|x-\tilde{k}|}{x+\tilde{k}} dx = -\frac{e^2 k_F}{\pi} \left(1 + \frac{1-\tilde{k}^2}{2\tilde{k}} \ln \frac{1+\tilde{k}}{1-\tilde{k}} \right) \in \mathbf{R} \quad (11.29) \end{aligned}$$

Здесь было введено:

$$x = \frac{p}{k_F}, \tilde{k} = \frac{k}{k_F} \quad (11.30)$$

Выражение получилось независимым от ω_n . Замена $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ не меняет результат выражения. В связи с этим можно утверждать, что

$$\text{Re}\Sigma_1^{*R} = \Sigma_1^{*R} \quad (11.31)$$

Плотность состояний:

$$\frac{dN}{d\varepsilon} \sim \int \frac{dS_\varepsilon}{|\nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k}}|_{E_{\vec{k}}=\varepsilon}} \quad (11.32)$$

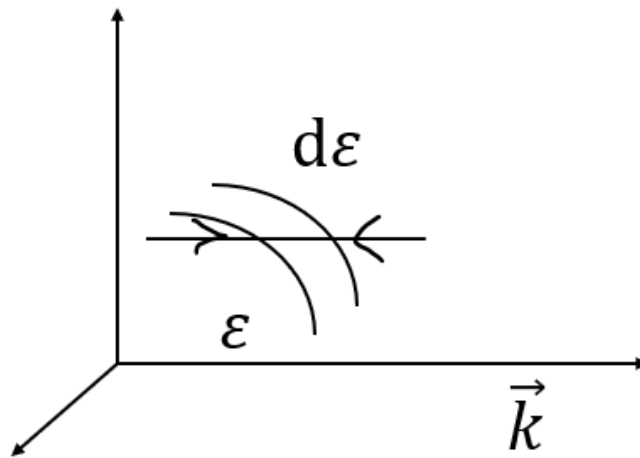


Рис. 11.5. Плотность состояний – как много квантовомеханических состояний помещается в сферическом слое с точки зрения энергии

Пусть ε соответствует k_F . Тогда получим логарифмическую расходимость. Знаменатель стремится к бесконечности, то есть происходит интегрирование нулей. На границе Ферми нет никаких состояний.

б. Вычислим теплоемкость.

$$C_{VN} = \theta \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)_{VN} \quad (11.33)$$

$$S \leftarrow \Omega \leftarrow \Sigma_1^* \quad (11.34)$$

Получаем асимптотику:

$$C_{VN} \rightarrow \theta \ln \theta \quad (11.35)$$

Однако это не наблюдается, асимптотика должна быть линейной.

То есть, первого порядка не достаточно, должны быть и другие слагаемые.

Второй порядок теории возмущений

Все неприводимые диаграммы располагаем в последовательность.

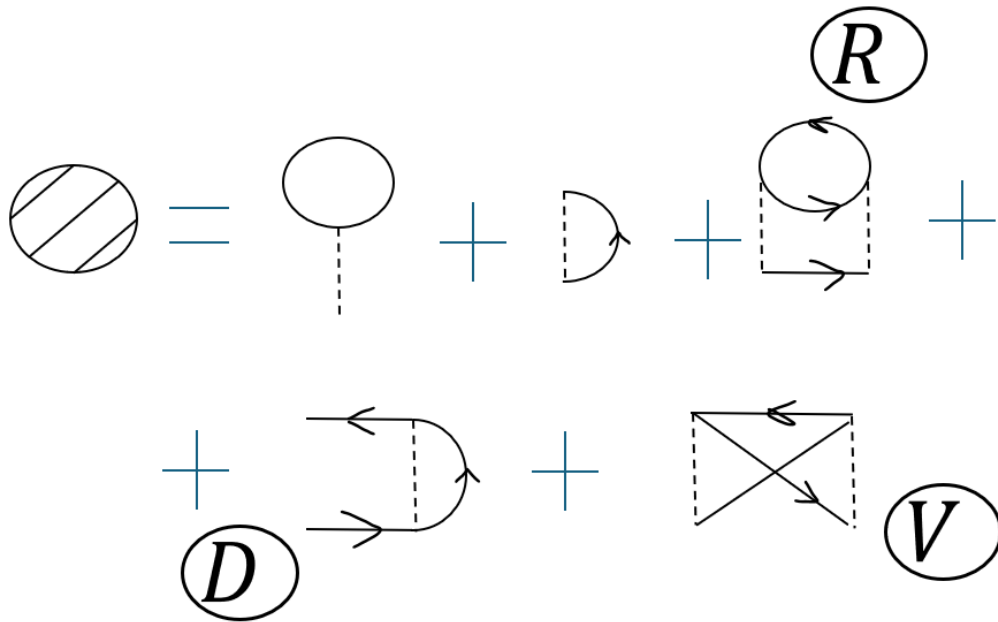


Рис. 11.6. Неприводимые диаграммы

Из пяти диаграмм остаются только три.

По правилам Фейнмана:

$$\Sigma_D^*(k, \omega_n) = \frac{1}{\beta^2} \sum_{\vec{q}, m} \sum_{\vec{k}', n'} \frac{v_{\vec{q}}}{V} \frac{v_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{q}}}{V} G_0(\vec{k}-\vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) \cdot G_0(\vec{k}, \sigma, \omega_{n'}) G_0(\vec{k}-\vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) e^{i\omega_{n'}0^+} \quad (11.36)$$

Такое выражение согласуется с диаграммой D.

Рассмотрим еще одну диаграмму.

$$\Sigma_J^*(k, \omega_n) = \frac{1}{\beta^2} \sum_{\vec{q}, m} \sum_{\vec{k}', n'} \frac{v_{\vec{q}}}{V} \frac{v_{\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}}}{V} \cdot G_0(\vec{k}-\vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) G_0(\vec{k}', \sigma, \omega_{n'}) G_0(\vec{k}+\vec{q}, \sigma, \omega_n + \omega_m) \quad (11.37)$$

Третье слагаемое связано с диаграммой типа «кольцо».

$$\Sigma_R^*(k, \omega_n) = \frac{-1}{\beta^2} \sum_{\vec{q}, m} \sum_{\sigma'} \sum_{\vec{k}', n'} \frac{v_{\vec{q}}}{V}$$

$$\cdot G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) G_0(\vec{k}', \sigma, \omega_{n'}) G_0(\vec{k} + \vec{q}, \sigma', \omega_{n'} + \omega_m) \quad (11.38)$$

Можно взять сумму по m и n' , это дает конечный вклад. При суммировании по q происходит переход к интегрированию.

$$\sum_{\vec{q}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \quad (11.39)$$

Тогда:

$$\int \left(\frac{1}{q^2}\right)^2 d\vec{q} = \int d\Omega_q \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{q^4} \rightarrow \infty \quad (11.40)$$

При малых значениях q интеграл расходится. Это совпадение есть только в диаграмме типа «кольцо», она является сингулярной и приносит неприятности. Нужно учитывать расходящиеся диаграммы отдельно, именно они сокращают бесконечный вклад от первого порядка.

Степени расходимости диаграмм

Рассмотрим набор диаграмм.

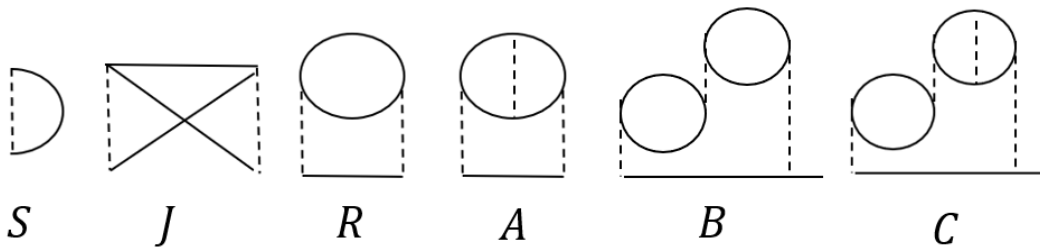


Рис. 11.7. Набор диаграмм

Диаграммы S и J содержат множители $\int \frac{d\vec{q}}{q^2}$, поэтому они не расходятся.

Диаграммы R и A имеют асимптотику $\int \frac{d\vec{q}}{q^4}$.

Диаграммы B и C имеют асимптотику $\int \frac{d\vec{q}}{q^6}$.

Степень расходимости – наибольшее число линий взаимодействия, имеющих одинаковое волновое число, в нашем случае это q .

$$\omega(S) = \omega(J) = 1 \quad (11.41)$$

$$\omega(R) = \omega(A) = 2 \quad (11.42)$$

$$\omega(B) = \omega(C) = 3 \quad (11.43)$$

Нужно понять, где бесконечность сильнее.

Рассмотрим общий вид для диаграммы порядка N . У такой диаграммы n линий взаимодействия, $2n - 1$ внутренних линий.

$$\Sigma_n^* \sim \frac{1}{\beta^n} \int d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_n v_{\vec{q}_1} \dots v_{\vec{q}_n} \sum_{\omega_{n_1}, \dots, \omega_{n_m}} \prod_{j=1}^{2n-1} G_0(\vec{k}, \sigma_j, \tilde{\omega}_j) \quad (11.44)$$

$$\frac{1}{\beta} \sim \theta \sim k_F^2 \quad (11.45)$$

Каждый промежуточный волновой вектор:

$$p_1 \sim k_F \quad (11.46)$$

$$v_{\vec{q}} \sim \frac{1}{q^2} \sim k_F^{-2} \quad (11.47)$$

Анализируя идеальные функции Грина:

$$G_0 = \frac{1}{i\tilde{\omega}_j - \varepsilon_{\vec{k}}} \sim \frac{1}{k_f^2} \quad (11.48)$$

Можно получить:

$$\Sigma_R^* \sim k_F^{2n+3n-2n-2(2n-1)} = k_F^{-n+2} \quad (11.49)$$

В пределе большой плотности:

$$n \longrightarrow \infty, k_F \longrightarrow \infty \quad (11.50)$$

Теория возмущений в этом случае работает наиболее эффективно.

Для каждой из диаграмм можно заполнить таблицу:

Название	Степень расходимости	Асимптотика по k_F
S	1	k_F
J	1	1
R	2	1
A	2	$\frac{1}{k_F}$
B	3	$\frac{1}{k_F}$
C	3	$\frac{1}{k_F^2}$

Таблица 11.1. Сводная таблица по степеням расходимости и асимптотикам

Степень расходимости определяется по асимптотике q вблизи нуля. Из этой таблицы можно увидеть, какая из диаграмм быстрее растет по энергии.

Экранировка кулоновского взаимодействия.

Функция корреляции плотности

Электронный газ. Продолжение

Среди диаграмм Фейнмана существуют расходящиеся варианты, а также те, которые вносят больший или меньший вклад в общую картину. Диаграммы можно классифицировать по степени расходимости. Особенно интересной для дальнейшего обсуждения является диаграмма типа кольцо.

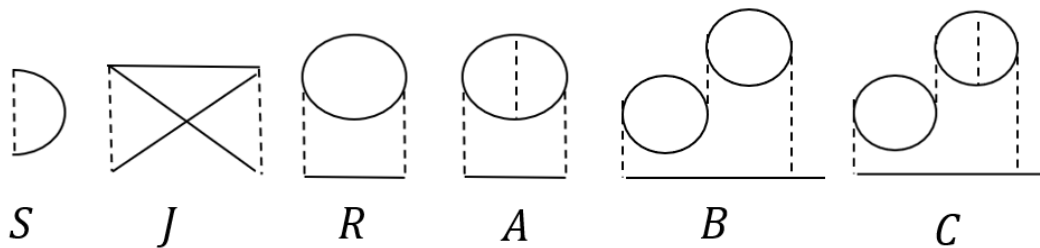


Рис. 12.1. Набор диаграмм

ω – число линий, которые несут одинаковый импульс. Также была рассмотрена асимптотика по числу Ферми, и составлена соответствующая таблица. Записывая общий вид вклада, можно «обезразмерить» все в терминах k_F . При сравнении последовательных пар становится очевидным, что каждый первый элемент из пары растет быстрее. Диаграммы рассчитываются, раскладывая по степеням постоянного взаимодействия, то есть по количеству N . Эти асимптотики соответствуют k_F^{2-n} . В каждом порядке нужно выбрать диаграмму с наибольшей степенью расходимости.

Важно обратить внимание на диаграммы типа R и B , где нет внутренних включений. Возникает потребность отдельно просуммировать вклады с кольцами без внутренних линий, а потом добавить диаграмму типа S . Такой подход носит название аппроксимации RPA.

$$\Sigma^* = S + R + B + \dots \quad (12.1)$$

Можно добавлять все больше колец после знака суммирования.

Суммирование диаграмм R

Запишем вклады в ту часть функции Грина, которая соответствует собственной энергии:

$$\begin{aligned} \Sigma_{RPA}^*(k, \omega_n) = & \frac{-1}{\beta} \sum_{\vec{q}, m} \frac{v_q^2}{V^2} G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) \sum_{\vec{k}', \sigma', \omega_{n'}} G_0(\vec{k}', \sigma', \omega_{n'}) \cdot \\ & \cdot G_0(\vec{k}' + \vec{q}, \sigma', \omega_{n'} + \omega_m) + \frac{-1}{\beta^3} \sum_{\vec{q}, m} \frac{v_q^3}{V^3} G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) B^2(q, \omega_m) + \dots \end{aligned} \quad (12.2)$$

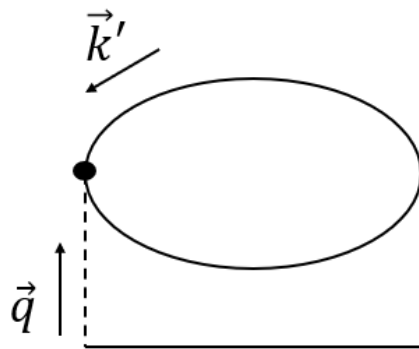


Рис. 12.2. Первый случай

Теперь пусть два кольца соединены последовательно. Волновой вектор замыкается сам на себя. Такие структуры полностью подобны.

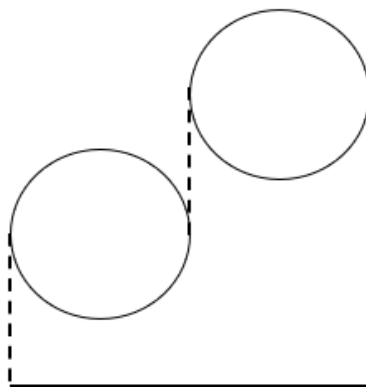


Рис. 12.3. Второй вклад – два соединенных последовательно кольца

Обозначим:

$$\sum_{\vec{k}, \sigma', \omega_{n'}} G_0(\vec{k}', \sigma', \omega_{n'}) \cdot G_0(\vec{k}' + \vec{q}, \sigma', \omega_{n'} + \omega_m) = B \quad (12.3)$$

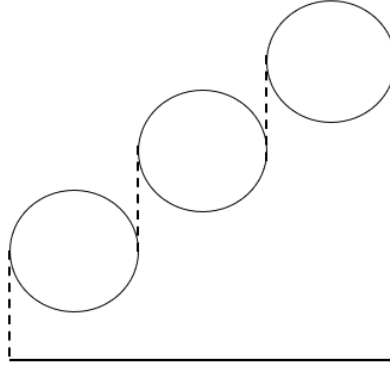


Рис. 12.4. Третий вклад

С учетом нарастающего B можно провести суммирование. Удобно ввести:

$$\Pi(q, \omega_n) = \frac{1}{\beta V} B(q, \omega_m) \quad (12.4)$$

Эта диаграмма – чистый неотсуммированный пузырьек с двумя линиями. Тогда функция Грина, а именно интересующие нас вклады:

$$\begin{aligned} \Sigma_{RPA}^* &= -\frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{q}, m} v_{\vec{q}}^2 G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) (\Pi_0(q, \omega_m) + v_{\vec{q}} \Pi_0^2(q, \omega_n) + \dots) = \\ &= -\frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{q}, m} v_{\vec{q}}^2 G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) \cdot \Pi_{RPA}(q, \omega_m) \end{aligned} \quad (12.5)$$

Получается коллективный вклад с учетом взаимодействия. Пузырек можно представить в виде двух замыкающихся линий.

Это можно записать в виде:

$$\Pi_{RPA} = \Pi_0 + \Pi_0 v_{\vec{q}} \Pi_{RPA} \quad (12.6)$$

Получили уравнение, которое повторяет уравнение Дайсона. Решение легко можно найти следующим образом:

$$\Pi_{RPA}(\vec{q}, \omega_m) = \frac{\Pi_0(\vec{q}, \omega_m)}{1 - v_{\vec{q}} \Pi_0(\vec{q}, \omega_m)} \quad (12.7)$$

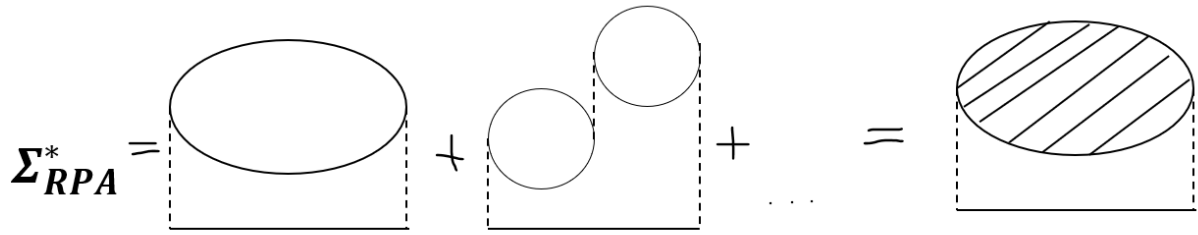


Рис. 12.5. Диаграмма с использованием «одетого пузырька»

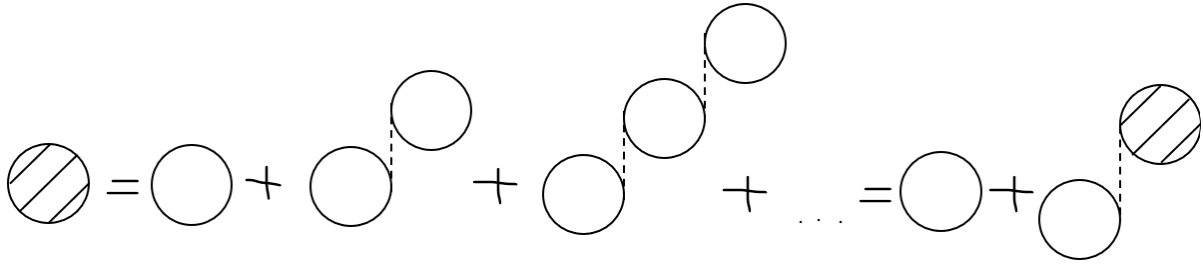


Рис. 12.6. «Одетый пузырек»

Оказывается, что такая одетая функция соответствует поляризованности электронного газа. $\Pi_0(\vec{q}, \omega_m)$ – виртуальные процессы создания частицы и античастицы. Можно считать, что электрон, который бежит сверху, был создан в состоянии k', σ' . Он поглощает \vec{q} , создается пара. Наблюдаются последовательные акты создания электрона и дырки. Для графического расчета необходимо найти Π_0 – простейшая диаграмма.

$$\Pi_0 = \frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{k}'\sigma'} \frac{1}{i\omega_m - (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}})} \sum_n \left(\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}}} - \frac{1}{i(\omega_n + \omega_m) - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}} \right) e^{i\omega_n 0^+} \quad (12.8)$$

$$\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{B-A}{AB} \quad (12.9)$$

Частотные представления переводятся во временные. Так как:

$$\sum_n \frac{e^{i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}}} = \sum_n G_0(\vec{k}\sigma\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} = \beta G_0(\vec{k}\sigma, 0^-) = \beta \langle a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \rangle = \beta F(\varepsilon_{\vec{k}}) \quad (12.10)$$

Получили:

$$\Pi_0(\vec{q}, \omega_n) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}}) - F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - i\omega_m)}{i\omega_m - (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}})} \quad (12.11)$$

\vec{q}, ω_n – характеристики, которые привносятся извне. Двойка возникла из-за суммирования по спину.

Замечание.

$$\frac{1}{e^{\epsilon\beta} + 1} \quad (12.12)$$

$$e^{i\omega_m\beta} = 1 \quad (12.13)$$

Поэтому добавку $-i\omega_m$ можно занулить. Тогда результат следующий:

$$\Pi_0(\vec{q}, \omega_n) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\epsilon_{\vec{k}}) - F(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{i\omega_m - (\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})} \quad (12.14)$$

Формула характеризует поляризуемость газа без учета взаимодействий. Результат был получен в 1954 году.

Экранировка кулоновского взаимодействия

Взаимодействие учесть можно. К функции, которая соответствует идеальной системе добавим взаимодействие.

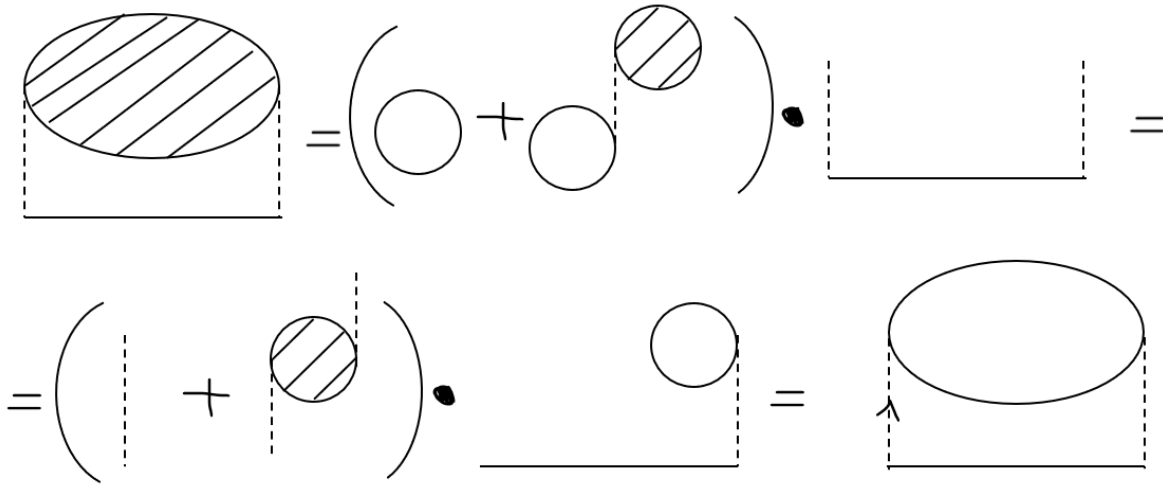


Рис. 12.7. Добавление взаимодействия

Каждой из диаграмм дополнительно дописываем некоторые графические элементы как показано на рисунке. Суммы можно добавлять либо в конец, либо в начало. Экранированное взаимодействие подправлено с учетом промежуточных процессов создания квазичастицы и античастицы. На уровне формул:

$$V = v_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \Pi_{RPA} v_{\vec{q}} = v_{\vec{q}} (1 + v_{\vec{q}} \Pi_{RPA}) = v_{\vec{q}} \left(1 + \frac{v_{\vec{q}} \Pi_0}{1 - v_{\vec{q}} \Pi_0} \right) =$$

$$= \frac{v_{\vec{q}}}{1 - v_{\vec{q}} \Pi_0(\vec{q}, \omega_m)} = \frac{v_{\vec{q}}}{\epsilon(\vec{q}, \omega_m)} \quad (12.15)$$

$\epsilon(\vec{q}, \omega_m)$ – диэлектрическая проницаемость, функция, которая характеризует влияние среды с учетом параметров взаимодействующей частицы. Эта формула учитывает экранировку за счет поляризации вокруг заряда, который помещен в среду.

Функция корреляции плотности

Применим общий формализм к нашему случаю: электронный газ в слабом электрическом поле. Общая идея такова: пусть мы возмущаем систему, что описывается гамильтонианом:

$$H_{ex}(t) = -e \int \varphi(\vec{r}, t) n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (12.16)$$

$n(\vec{r})$ – концентрация, пересчитывает заряды. Изменение средней плотности, то есть среднего числа частиц, может быть описана следующим образом:

$$\delta \langle n \rangle(\vec{r}, t) = -e \int_{t_0}^t dt' \int d\vec{r}' \varphi(\vec{r}', t') D^R(\vec{r}, t, \vec{r}', t') \quad (12.17)$$

В частотном представлении изменение может быть представлено как:

$$\delta \langle n \rangle(\vec{q}, \omega) = -e \varphi(\vec{q}, \omega) D^R(\vec{q}, \omega) \quad (12.18)$$

Тогда восприимчивость по отношению к электрическому полю в слабом поле совпадает с коррелятором:

$$\xi_0 = D^R \quad (12.19)$$

$$D^R(\vec{r}, t, \vec{r}', t') = i\theta(t - t') \langle [n_H(\vec{r}, t), n_H(\vec{r}', t')] \rangle \quad (12.20)$$

Такие функции называются запаздывающими. Берем операторы в представлении Гейзенберга. Если предположить, что система является консервативной, а взаимодействие, обеспечивающее связь между электронами, инвариантно относительно трансляций, то

$$D^R(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} D^R(\vec{q}, t - t') \quad (12.21)$$

Наложим ограничения на аргументы в первой функции D^R . Независимо совершим Фурье-преобразование для двух операторов:

$$D^R(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = -i\theta(t - t') \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{V} \frac{e^{i\vec{q}'\vec{r}'}}{V} = \langle n_H(\vec{q}, t), n_H(\vec{q}', t') \rangle =$$

$$= -i\theta(t-t') \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} e^{i\vec{q}(\vec{r}-\vec{r}')} e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\vec{r}'} < n_H(\vec{q}, t), n_H(\vec{q}', t') > \quad (12.22)$$

Зависимость от \vec{r}' нужно убрать. Единственный способ это сделать:

$$(\vec{q}' + \vec{q}) \vec{r}' = 0 \quad (12.23)$$

Тогда с необходимостью:

$$\vec{q}' + \vec{q} = 0 \quad (12.24)$$

По двум аргументам можно установить антисимметричность. Учтем это в исходном определении. Таким образом, конструкция для запаздывающего коррелятора упрощается:

$$D^R(\vec{q}, t - t') = -i\theta(t - t') \frac{1}{V} < [n_H(\vec{q}, t), n_H(-\vec{q}, t)] > \quad (12.25)$$

Распишем каждый оператор в явном виде, переводя из представления Гейзенберга в представление Шредингера:

$$\begin{aligned} n_H(\vec{q}, t) &= e^{i\vec{H}t} n_{\vec{q}} e^{-i\vec{H}t} = e^{i\vec{H}t} \sum_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} e^{-i\vec{H}t} = \\ &= \sum_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{H}t} a_{\vec{k}\sigma}^+ e^{-i\vec{H}t} a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} e^{-i\vec{H}t} = \sum_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma H}^+(t) a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma H}(t) \end{aligned} \quad (12.26)$$

Такой вид удобен, поскольку знаем решение:

$$a_{kH}(t) = e^{-i\varepsilon_k t} a_k(0) \quad (12.27)$$

$$a_H(\vec{q}, t) = \sum_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} e^{-i(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}\sigma})t} \quad (12.28)$$

Нужно рассчитать коммутатор:

$$\begin{aligned} [a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}, a_{\vec{k}'\sigma'}^+ a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}] &= a_{\vec{k}\sigma}^+ \left(-a_{\vec{k}'\sigma'}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} + \delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}} \delta_{\sigma\sigma'} \right) a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'} - \text{обр. послед.} = \\ &= -a_{\vec{k}'\sigma'}^+ \left(-a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'} a_{\vec{k}\sigma}^+ + \delta_{\vec{k},\vec{k}'-\vec{q}} \delta_{\sigma\sigma'} \right) a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} + a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'} \delta_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}} \delta_{\sigma\sigma'} - \text{обр. послед.} = \\ &= \left(a_{\vec{k}\sigma}^+ \right) a_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'} - a_{\vec{k}'\sigma'}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} \delta_{\vec{k},\vec{k}'-\vec{q}} \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad (12.29)$$

Нужно учесть, что были экспоненты с энергиями.

$$e^{i(\varepsilon_{\vec{k}\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})t} e^{i(\varepsilon_{\vec{k}'\sigma'} - \varepsilon_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'})t'} = e^{i(\varepsilon_{\vec{k}\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})(t-t')} \quad (12.30)$$

Таким образом:

$$D^R(q, t - t') = -i\theta(t - t') \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} e^{i(\varepsilon_{\vec{k}\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})(t-t')} < a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} - a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} > =$$

$$= -i\theta(t-t') \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} e^{i(\epsilon_{\vec{k}\sigma} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})(t-t')} \left(F(\epsilon_{\vec{k}\sigma}) - F(\vec{k} - \vec{q}, \sigma) \right) \quad (12.31)$$

Далее требуется перейти в частотное представление.

$$D^R(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} D^R(\vec{q}, t) e^{i\omega t} dt \quad (12.32)$$

Плазмоны. Электроны в периодическом потенциале

Электронный газ. Продолжение

Функция корреляции плотности

Диаграммы по типу кольца содержат замкнутые фермионные ветви. Эти диаграммы вносят основной вклад в наблюдаемые.

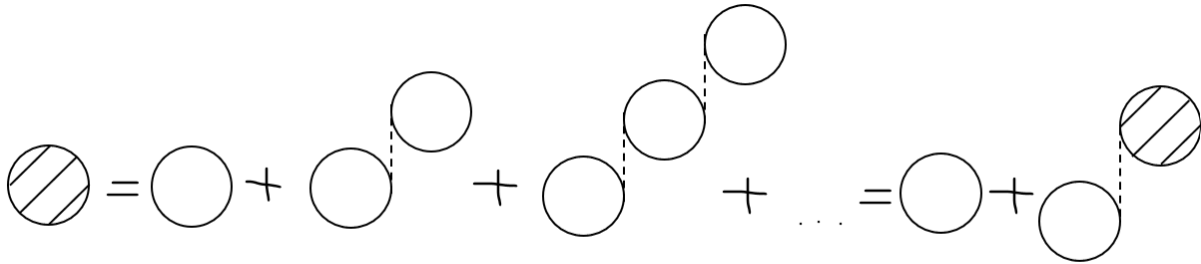


Рис. 13.1. «Одетый пузырек»

Конкретное выражение для такой конструкции получается из анализа диаграммы Фейнмана:

$$\Pi_0 = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\epsilon_{\vec{k}}) - F(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{i\omega_m - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \epsilon_{\vec{k}}} \quad (13.1)$$

Для понимания физического смысла такой конструкции был введен коррелятор:

$$D^R(\vec{r}t, \vec{r}'t') = -i\theta(t - t') \langle [n_H(\vec{r}t), n_H(\vec{r}'t')] \rangle \quad (13.2)$$

Это означает взаимосвязь двух плотностей в разных временных точках. Будем считать гамильтониан консервативным.

$$D_0^R(\vec{r}, t - t') = -i\theta(t - t') \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i(\epsilon_{\vec{k}\sigma} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})(t-t')} \left(F(\epsilon_{\vec{k}\sigma}) - F(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}) \right) \quad (13.3)$$

Переведем функцию в частотное представление. Для этого возьмем Фурье-образ:

$$\begin{aligned} D_0^R(\vec{q}, \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} D_0^R(\vec{q}, t) e^{i\omega t} dt = \int_0^{\infty} dt \frac{-i}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} e^{i(\omega + \epsilon_{\vec{k}\sigma} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})t} \left(F(\epsilon_{\vec{k}\sigma}) - F(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}) \right) = \\ &= -\frac{i}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} \left(F(\epsilon_{\vec{k}\sigma}) - F(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}) \right) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega - \epsilon_{\vec{k}\sigma} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})t - \eta t} = \end{aligned}$$

$$= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}\sigma}) - F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma})}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}\sigma} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} + i\eta} \quad (13.4)$$

Получили правило обхода полюсов. Из требований сходимости интеграла по времени образуется малая положительная добавка. Тогда:

$$D_0^R(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}}) - F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0} \quad (13.5)$$

Двойка появилась из суммирования по спину.

Переведем функцию Π_0 из мнимого времени в вещественное. Замена:

$$i\omega_n \longrightarrow \omega + i0^+ \quad (13.6)$$

Таким образом, функция корреляции плотности совпадает с функцией пузырька по следующими аргументами:

$$D_0^R(\vec{q}, \omega) = \Pi_0(\vec{q}, i\omega_n \longrightarrow \omega + i0^+) \quad (13.7)$$

Такая функция называется функцией поляризуемости.

Экранированный потенциал имеет вид:

$$V = \frac{v\vec{q}}{1 - v\vec{q}\Pi_0} \quad (13.8)$$

$$\Pi_{RPA} = \frac{\Pi_0(\vec{q}, \omega_n)}{1 - v\vec{q}\Pi_0} \quad (13.9)$$

Для системы с взаимодействием справедливость сохраняется. Без доказательства можно переписать аналогию для системы с взаимодействием:

$$D^R(\vec{q}, \omega) = \Pi_{RPA}(\vec{q}, i\omega_m \longrightarrow \omega + i0^+) \quad (13.10)$$

Пример: плазмоны

В плазме, где в среднем заряженные частицы компенсируют друг друга, можно возбудить колебания, когда отрицательный заряд смещается относительно положительного, образуется диполь. В силу релаксации образуется обратное смещение, получается динамический процесс. Наблюдаются продольные колебания в плазме. Кванты такого колебания – плазмоны. Будем считать электронный газ невзаимодействующим, а число частиц фиксированным. Проведем вычисления для идеальной

СИСТЕМЫ.

$$D_0^R(\vec{q}, \omega) = \Pi_0(\vec{q}, i\omega_n \rightarrow \omega + iO^+) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}}) - F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + iO^+} \quad (13.11)$$

Энергия одного элктрона:

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\vec{k}^2}{2m} \quad (13.12)$$

Мнимая часть отвечает за распад состояния, а вещественная часть – за уровни возбуждения.

$$Re\Pi_0 = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}}) - F(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}} \quad (13.13)$$

Упростим конструкцию благодаря симметрии.

$$\vec{k} \rightarrow -\vec{k} - \vec{q} \quad (13.14)$$

Тогда:

$$Re\Pi_0 = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}})}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}} - \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}})}{\omega - \varepsilon_{\vec{k}} + \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}} = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) \frac{2(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega^2 - (\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}})^2} \quad (13.15)$$

Такие колебания высокочастотные, поэтому можем разложить следующим образом:

$$\omega \gg |\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}| \quad (13.16)$$

$$\begin{aligned} Re\Pi_0 &= \frac{4}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{F(\varepsilon_{\vec{k}}) (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}})}{\omega^2} \frac{1}{1 - \left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}}{\omega}\right)^2} = \\ &= \frac{4}{V\omega^2} \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}) \left[1 + \frac{(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}})^2}{\omega^2} + \dots\right] \end{aligned} \quad (13.17)$$

Запишем утверждение:

$$\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left((\vec{k} + \vec{q})^2 - \vec{k}^2 \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (q^2 + 2\vec{k}\vec{q}) \quad (13.18)$$

Рассмотрим слагаемое, которое линейно по этому выражению:

$$\sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) \cdot \vec{k}\vec{q} \quad (13.19)$$

q – фиксированное внешнее число. Из курса статистической физики:

$$F(\varepsilon) = \frac{1}{\frac{\varepsilon}{\hbar\theta} + 1} \quad (13.20)$$

Нормировка:

$$\sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) = N \quad (13.21)$$

Первая сумма дает коэффициент 2. Тогда:

$$\frac{\hbar^2 q^2 N}{2m} + 0 \quad (13.22)$$

Далее рассмотрим величину:

$$A = \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon) (\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}})^3 = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3 \sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) (q^2 + 2kq\cos\Theta)^3 \quad (13.23)$$

Будем пользоваться формулой Тейлора-Маклорена:

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2\pi \int_{-1}^1 du \int_0^{k_F} k^2 dk \quad (13.24)$$

Рассмотрим случай бесконечно низкой температуры. Поэтому на верхнем пределе во втором интеграле k_F .

$$\int_{-1}^1 du (q^6 + 6kq^5u + 12k^2q^4u^2 + 8k^3q^3u^3) \quad (13.25)$$

Рассмотрим два вклада.

Для q^6 :

$$\sum_{\vec{k}} F(\varepsilon_{\vec{k}}) = \frac{N}{2} \quad (13.26)$$

Для q^4 :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3 \frac{V}{(2\pi)^2} 8q^4 \int_0^{k_F} k^2 k^2 dk = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3 \frac{V}{(2\pi)^2} 8q^4 \frac{k_F^5}{5} \quad (13.27)$$

Тогда:

$$A = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3 q^6 \frac{N}{2} + \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3 \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{8}{5} q^4 K_F^5 \quad (13.28)$$

Тогда:

$$Re\Pi_0 = \frac{4}{V\omega^2} \left(\frac{\hbar^2 q^2 N}{2m} \frac{1}{2} + \frac{1}{\omega^2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^3 \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{8}{5} q^4 k_F^5 \right) = \frac{n}{m} \left(\frac{q}{\omega} \right)^2 + \left(\frac{q}{\omega} \right)^4 \frac{k_F^2 k_F^3}{m^2 \pi^2} \frac{1}{5m} \quad (13.29)$$

Используем известное равенство:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \quad (13.30)$$

$$Re\Pi_0 = \frac{n}{m} \left(\frac{q}{\omega} \right)^2 \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{qv_F}{\omega} \right) + \dots \right] \quad (13.31)$$

Важно, что:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} \quad (13.32)$$

Результат получен для идеальной системы. Учтем теперь взаимодействие.

$$D^R(\vec{q}, \omega) = \Pi_{RPA}(\vec{q}, \omega) = \frac{\Pi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - v_{\vec{q}} \Pi_0(\vec{q}, \omega)} = \frac{\Pi_0}{1 - v_{\vec{q}} Re\Pi_0 - iv_{\vec{q}} Im\Pi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (13.33)$$

если рассматриваем долгоживущее состояние, то:

$$\tau \sim \frac{-1}{2Im\Pi_0} \quad (13.34)$$

Тогда получаем спектр. Найдем полюс функции D^R , что соответствует долгоживущему состоянию.

$$1 - v_{\vec{q}} Re\Pi_0(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 n}{q^2} \frac{n}{m} \left(\frac{q}{\omega} \right)^2 \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{qv_F}{\omega} + \dots \right) \right] = 0 \quad (13.35)$$

ω можно выразить рекуррентным образом.

$$\omega^2 = \omega_p^2 \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{qv_F}{\omega} \right)^2 + \dots \right] \quad (13.36)$$

Плазменная частота:

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} \quad (13.37)$$

Решать будем методом итераций.

$$\omega^2 \simeq \omega_p^2 \left[1 + \frac{3}{5} \left(\frac{qv_F}{\omega_p} \right)^2 \right] \quad (13.38)$$

$$\omega(q) = \omega_p \left[1 + \frac{3}{10} \left(\frac{v_F}{\omega_p} \right)^2 q^2 \right] \quad (13.39)$$

Получили поправки от квантовых эффектов. Дополнительно получили: частота – это функция переданного от внешнего источника волнового вектора, то есть есть дисперсия.

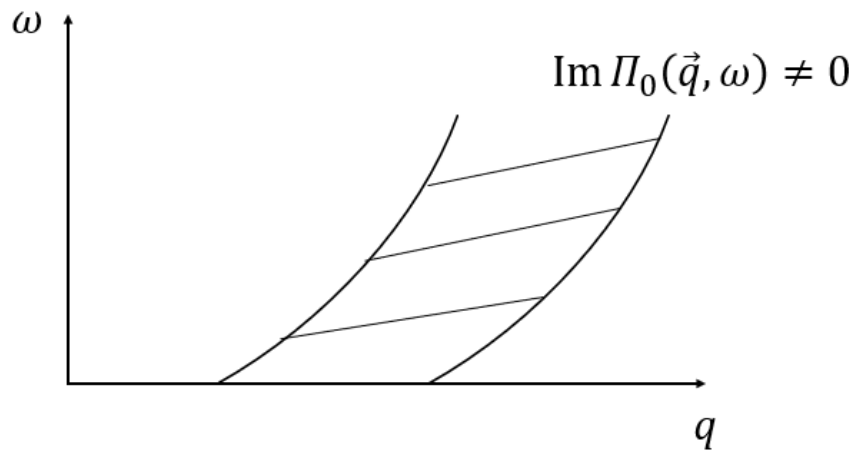


Рис. 13.2. Зависимость ω от q

Состояние не всегда долгоживущее. Внутри мнимая часть ненулевая. Состояние распадается довольно быстро. Энергия не передается системе.

Пусть частица находится на сфере Ферми. Волновой вектор налетающей волны сонаправлен с волновым вектором этой частицы. Эта частица поглощает энергию:

$$\hbar\omega_1 = \frac{\hbar q^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_F q}{m} \quad (13.40)$$

Если

$$\hbar\omega > \hbar\omega_1 \quad (13.41)$$

то закон сохранения энергии не сохраняется, процесс не идет. Аналогично и для ситуации, когда волновые векторы противоположно направлены, будет ограничение снизу.

Описание кристаллов

Электронны в периодическом потенциале

Применим методику функций Грина к кристаллам. Принципиальная идея – потенциал, в котором находятся электроны, периодический. Этого аппроксимируют периодической функцией:

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}) \quad (13.42)$$

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^3 n_i \vec{a}_i \quad (13.43)$$

Рассмотрим двумерную ситуацию. Вокруг атома создается потенциал. Если переносить атом периодическим образом вправо и вверх, то будет формироваться кристаллическая решетка. Можно описать только минимальную область. Элементарная ячейка несет в себе информацию о структуре решетки и о заполнении атомами. \vec{R} – переход к другому атому.

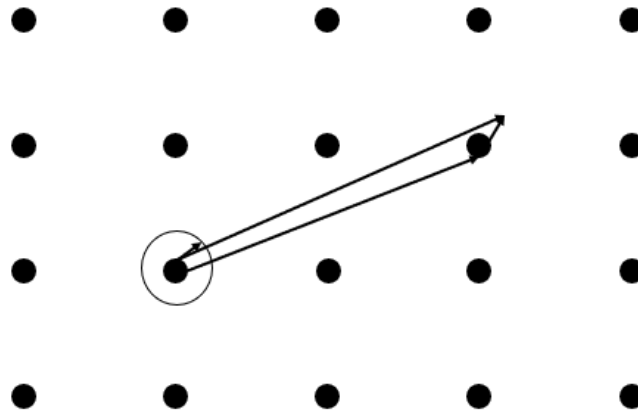


Рис. 13.3. Атом в кристаллической решетке

Можно при помощи оператора трансляции получить:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (13.44)$$

Периодические граничные условия:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (13.45)$$

N_i – количество атомов в направлении. i – любое из трех направлений. Тогда можно записать:

$$e^{iN_i \vec{k} \vec{a}_i} = 1, \quad i = 1, 2, 3 \quad (13.46)$$

Это свойство позволяет ввести обратные вектора решетки. Можно определить вектора:

$$\vec{b}_i \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (13.47)$$

Тогда:

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i, \quad m_i \in Z \quad (13.48)$$

Введем функции, которые будут заменять привычные волновые функции на функции с симметрией:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\vec{r}} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (13.49)$$

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) \quad (13.50)$$

Стационарное уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}}\phi_{\vec{k}} \quad (13.51)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{k})^2 + V(\vec{r})\right]u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}}u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (13.52)$$

Для произвольного i :

$$u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{R} + \vec{a}_i) \quad (13.53)$$

k – параметр. Уравнение дает перечень состояний с дискретным спектром.

$$E_{\vec{k},n}, n = 1, 2 \quad (13.54)$$

n – индекс зоны.

Введем произвольный вектор в k -пространстве:

$$\vec{G} = \sum_{i=1}^3 m_i \vec{b}_i, m_i \in Z \quad (13.55)$$

Вектор удовлетворяет равенству:

$$e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1 \quad (13.56)$$

Также для функции

$$f_{\vec{k}\vec{G}} = e^{i\vec{G}\vec{r}} \cdot u_{\vec{k}+\vec{G}} \quad (13.57)$$

записываются уравнения Шредингера в виде:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{k})^2 + V(\vec{r})\right]f_{\vec{k}\vec{G}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}+\vec{G}}f_{\vec{k}\vec{G}}(\vec{r}) \quad (13.58)$$

Смещение на \vec{r} дает ту же функцию в несмещенной точке.

$$f_{\vec{k}\vec{G}}(\vec{r} + \vec{R}) = f_{\vec{k}\vec{G}}(\vec{r}) \quad (13.59)$$

Тогда

$$f_{\vec{k}\vec{G}} = u_{\vec{k}} \quad (13.60)$$

$$E_{\vec{k}+\vec{G}} = E_{\vec{k}} \quad (13.61)$$

Важно заметить, что функцию φ можно выразить для разных векторов используя новые обнаруженные свойства:

$$\varphi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} u_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} f_{\vec{k}\vec{G}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (13.62)$$

Можно отменить добавление \vec{G} и ограничиться минимальным набором \vec{k} . Это называется зонами Бриллюэна. Первая зона:

$$\varphi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) |\sigma\rangle \quad (13.63)$$

Это состояние учитывает периодичность потенциала и называется состоянием Блоха.

Пример: состояние в металле в частично заполненной зоне.

$$u = \frac{1}{\sqrt{V}} \quad (13.64)$$

Уровень энергии:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (13.65)$$

m^* – эффективная масса электрона.

Электрон-фононное взаимодействие. Функция Грина свободного фонона

Описание кристаллов. Продолжение

Фононы

Наличие электрона в периодическом потенциале можно учесть. Каждый электрон характеризуется не только волновым вектором, но и индексом зоны. Однако не все волновые вектора эквивалентны. В прошлый раз удалось доказать, что в первой зоне Бриллюэна достаточно информации для описания всей системы в целом.

Фононы – частицы, подобные возбуждениям колебаний в кристаллической решетке. Будем описывать с квантовомеханической точки зрения. При комнатной температуре фононы отвечают за сопротивление материала, а при низких температурах – за сверхпроводимость.

В качестве простейшего примера рассмотрим одномерную решетку, атомы в которой расположены на расстоянии a друг от друга:

$$R_n = an \quad (14.1)$$

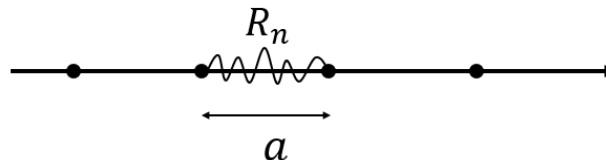


Рис. 14.1. Простейшая модель

Уравнение движения для одного такого атома:

$$M\ddot{u}_n = k(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \quad (14.2)$$

k – коэффициент жесткости. n – индекс атома, всего их N штук. Будем считать, что выход за самый правый атом возвращает к первому атому слева:

$$u_1 \equiv u_{N+1} \quad (14.3)$$

Будем использовать нормальные моды – колебания, когда все атомы колеблются с одной частотой и одним волновым числом:

$$u_n = Ae^{i(qna - \omega_q t)} \quad (14.4)$$

q – волновой вектор, ω – частота колебаний. Запишем дисперсионное соотношение – связь между волновым числом и частотой:

$$q_m = \frac{2\pi}{L} m \quad (14.5)$$

$$L = Na, m \in Z \quad (14.6)$$

Тогда:

$$\omega_q = 2\sqrt{\frac{k}{M}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad (14.7)$$

Получили дисперсионное соотношение. Можно заметить, что ω периодическая функция.

$$\omega_q = \omega_{-q} = \omega_{q + \frac{2\pi}{a}} \quad (14.8)$$

Это связано с тем, что по рассматриваемому пространству нельзя переходить на шаг меньше, чем a .

Наблюдаем первую зону Бриллюэна. Можно выбрать узкий диапазон:

$$q \in \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right) \quad (14.9)$$

Число нормальных мод будет равняться N . Сведем задачу к общей:

$$u_n \sim \sum_{q \in FBZ} Q_q e^{iqR_n} \quad (14.10)$$

$$R_n = na \quad (14.11)$$

Q_q – амплитуды нормальных мод. Все смещения должны быть вещественными, отсюда вытекает свойство:

$$u_n = u_n^* \longrightarrow Q_q^* = Q_{-q} \quad (14.12)$$

Для этой амплитуды нормальных мод можно ввести оператор рождения и ввести сопряженный этой координате импульс. Задача сведется к задаче про гармонический осциллятор.

$$H = \sum_{q \in FBZ} \hbar \omega_q \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2} \right) \quad (14.13)$$

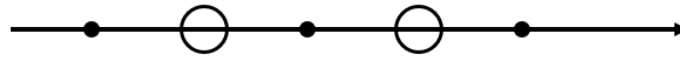


Рис. 14.2. Второй рассматриваемый случай

Будет N независимых фоновых мод. Фонон – квант возбуждения. Из суммы нужно исключить моду с нулевым волновым числом, чтобы не занулять частоту и не делать длину волны бесконечной.

Более сложная ситуация: есть атомы более легкие и более тяжелые.

$$\omega_q^2 = \frac{k}{\mu} \pm k \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4 \sin^2 \frac{qa}{2}}{M_1 M_2}} \quad (14.14)$$

Окажется, что портрет, который соответствует дисперсионному соотношению, выглядит следующим образом: Видны несколько ветвей мод – ветви фоновых мод.

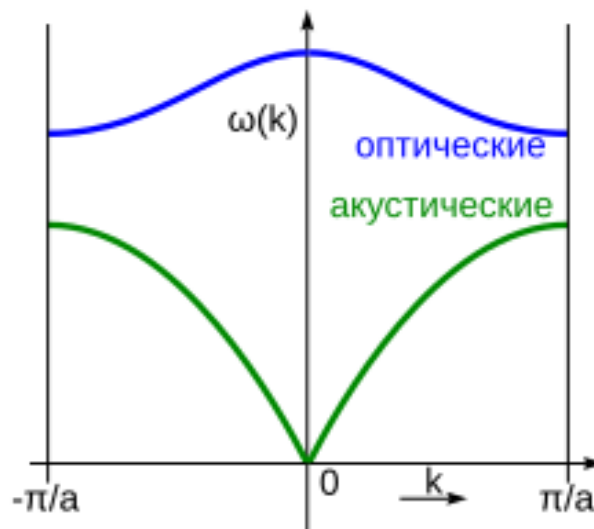


Рис. 14.3. Дисперсионное соотношение графически

Оптическая мода находится выше, возникает в ИК-диапазоне. Ниже находится акустическая мода.

$$H = \sum_{q \in FBZ} \sum_{\lambda} \hbar \omega_{q\lambda} \left(a_{q\lambda}^+ a_{q\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (14.15)$$

Операторы уже несут два индекса.

В трехмерии нужно иметь дело с \vec{q}, λ .

Количество колебательных мод, усредненное по распределению Гиббса для идеальной системы:

$$\langle n_{\vec{q},\lambda} \rangle_0 = \frac{1}{e^{\beta\omega_{\vec{q},\lambda}} - 1}, \quad \hbar \rightarrow 1 \quad (14.16)$$

Электрон-фононное взаимодействие. Приближение жестких ионов

В обычной кристаллической решетке состояние каждого электрона характеризуется тройкой (s, \vec{k}, σ) . Это волна Блоха. s – индекс зоны. Если фонон возмущает кристаллическую решетку, то атомы смещаются в каком-то из направлений, происходит изменение состояния электрона. Будем предполагать, что электрическое поле, создаваемое этими ионами, неотрывно от ионов и следует за их колебаниями. Это не так, когда молекулы полярные.

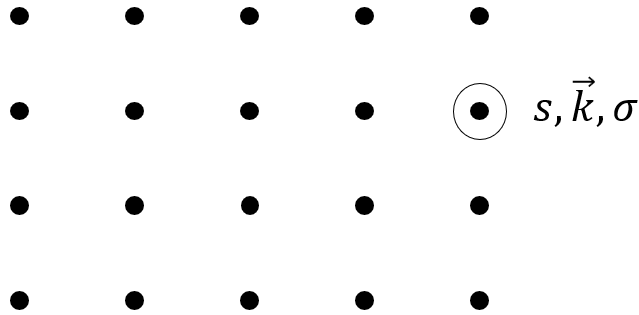


Рис. 14.4. Кристаллическая решетка

Величина взаимодействия электрона и иона в приближении электростатики:

$$V_{ei} = \sum_n V(\vec{r}_j - \vec{R}_n - \vec{u}_n) = \sum_n V(\vec{r}_j - \vec{R}_n) - \sum_n \nabla V(\vec{r}_j - \vec{R}_n) \cdot \vec{u}_n \quad (14.17)$$

Электрон-фононное взаимодействие:

$$H_{e-ph} = - \sum_{j,n} \nabla V(\vec{r}_j - \vec{R}_n) \vec{u}_n \quad (14.18)$$

Записываем смещение иона через операторы рождения и уничтожения и квантуем:

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{ss'} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{q}\lambda, q \neq 0} M_{\vec{q},\lambda}^{ss'} a_{s',\vec{k}+\vec{q},\sigma}^+ a_{s,\vec{k},\sigma} (a_{\vec{q},\lambda} + a_{-\vec{q},\lambda}^+) \quad (14.19)$$

Гамильтониан должен быть эрмитовым:

$$M_{-\vec{q}\lambda}^* = M_{-\vec{q},\lambda} \quad (14.20)$$

Пример. Пусть есть изотропный металл с одним атомом в элементарной ячейке. Тогда:

$$M_{\vec{q}} = \frac{i}{V} \sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}} \frac{4\pi Ze^2}{q_{TF}^2} \cdot \vec{q} \cdot \vec{P}_{\lambda}(\vec{q}) \quad (14.21)$$

$\vec{P}_{\lambda}(\vec{q})$ – вектор поляризации соответствующей фононной волны. Числа Томаса Ферми соответствуют экранировке потенциала. При нулевом волновом числе вся конструкция обращается в нуль.

Функция Грина свободного фонона

Определим функцию Грина как:

$$D^R(\vec{q}\lambda, t) = -i\theta(t) \langle [\varphi_{\vec{q}\lambda}(t), \varphi_{\vec{q}\lambda}^+(0)] \rangle \quad (14.22)$$

Фононное поле определяем так:

$$\varphi_{\vec{q}\lambda} = a_{\vec{q}\lambda} + a_{-\vec{q}\lambda}^+ \quad (14.23)$$

Вещественное представление Гейзенберга:

$$\varphi_{\vec{q}\lambda}(t) = e^{iHr} \varphi_{q\lambda} e^{-iHt}, \hbar \rightarrow 1 \quad (14.24)$$

В мнимом времени:

$$D(\vec{q}\lambda, \tau) = - \langle T \varphi_{\vec{q}\lambda}(\tau) \varphi_{\vec{q}\lambda}^+(0) \rangle \quad (14.25)$$

$$\varphi_{\vec{q}\lambda}(\tau) = e^{H\tau} \varphi_{q\lambda} e^{-H\tau} \quad (14.26)$$

Если определить τ на промежутке $[-\beta, \beta]$, то можно записать условие периодичности:

$$D(\vec{q}\lambda, \tau > 0) = D(\vec{q}\lambda, \tau - \beta) \quad (14.27)$$

$$D(\vec{q}\lambda, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} D(\vec{q}\lambda, \omega_m) e^{-i\omega_m \tau} \quad (14.28)$$

$$\omega_m = \frac{2\pi}{\beta} \quad (14.29)$$

$$D(\vec{q}\lambda, \omega_m) = \int_0^{\beta} D(\vec{q}\lambda, \tau) e^{i\omega_m \tau} d\tau \quad (14.30)$$

Теперь можно записать для свободных фононов. Для этого воспользуемся определением:

$$\begin{aligned} D_0(\vec{q}\lambda, \tau) &= - \langle \varphi_{\vec{q}\lambda}(\tau) \varphi_{\vec{q}\lambda}^+(0) \rangle_0 = \\ &= - \langle (a_{\vec{q}\lambda}(\tau) + a_{\vec{q}\lambda}^+(\tau)) (a_{\vec{q}\lambda}^+(0) + a_{-\vec{q}\lambda}(0)) \rangle_0 \end{aligned} \quad (14.31)$$

Используем представление Гейзенберга:

$$\frac{d}{dt} a_{\vec{q}\lambda}(\tau) = \frac{1}{\hbar} [H(\tau), a_{\vec{q}\lambda}(\tau)] \quad (14.32)$$

$$H = \sum_{\vec{q}\lambda} \hbar \omega_{\vec{q}\lambda} \left(a_{\vec{q}\lambda}^+ a_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (14.33)$$

Уже было в общем виде доказано, что:

$$[H(\tau), a_{\vec{q}\lambda}(\tau)] = -\omega_{\vec{q}\lambda} a_{\vec{q}\lambda}(\tau) \quad (14.34)$$

Явный вид оператора уничтожения:

$$a_{\vec{q}\lambda}(\tau) = e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} a_{\vec{q}\lambda}(0) \quad (14.35)$$

$$a_{-\vec{q}\lambda}^+(\tau) = e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} \cdot a_{-\vec{q}\lambda}^+(0) \quad (14.36)$$

Нужно записать, что

$$\begin{aligned} D_0(\vec{q}\lambda, \tau) &= -e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} \langle a_{\vec{q}\lambda} a_{\vec{q}\lambda}^+ \rangle_0 - e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} \langle a_{\vec{q}\lambda} a_{-\vec{q}\lambda} \rangle_0 - \\ &- e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} \langle a_{\vec{q}\lambda}^+ a_{-\vec{q}\lambda}^+ \rangle_0 - e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} \langle a_{-\vec{q}\lambda}^+ a_{-\vec{q}\lambda} \rangle_0 \end{aligned} \quad (14.37)$$

Причем:

$$\langle a_{\vec{q}\lambda} a_{-\vec{q}\lambda} \rangle_0 = \langle a_{\vec{q}\lambda}^+ a_{-\vec{q}\lambda}^+ \rangle_0 = 0 \quad (14.38)$$

$$\langle a_{-\vec{q}\lambda}^+ a_{-\vec{q}\lambda} \rangle_0 \neq 0 \quad (14.39)$$

Учтем физический смысл.

$$\begin{aligned} D_0(\vec{q}\lambda, \tau) &= -e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} \left(1 + \langle a_{\vec{q}\lambda}^+ a_{\vec{q}\lambda} \rangle_0 \right) - \\ &- e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} \langle a_{\vec{q}\lambda}^+ a_{-\vec{q}\lambda} \rangle_0 = - \left(e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} (1 + B(\omega_{\vec{q}\lambda})) + e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} B(\omega_{-\vec{q}\lambda}) \right) \end{aligned} \quad (14.40)$$

Статистика Бозе-Эйнштейна:

$$B(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1} \quad (14.41)$$

Учтем, что

$$\omega_{-\vec{q}\lambda} = \omega_{\vec{q}\lambda} \quad (14.42)$$

Преобразуем статистику от отрицательного аргумента следующим образом. Рассмотрим статистику

$$B(-\varepsilon) = \frac{1}{e^{-\beta\varepsilon} - 1} = \frac{e^{\beta\varepsilon}}{1 - e^{\beta\varepsilon}} = -1 + \frac{1}{1 - e^{\beta\varepsilon}} = -1 - B(\varepsilon) \quad (14.43)$$

Используем эту связь.

$$D_0(\vec{q}\lambda, \tau) = - (e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} B(\omega_{\vec{q}\lambda}) - e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\tau} B(-\omega_{\vec{q}\lambda})) \quad (14.44)$$

Переведем результат в частотное представление.

$$\begin{aligned} D_0(\vec{q}\lambda, \omega_m) &= \int_0^\beta D_0(\vec{q}\lambda, \tau) e^{i\omega_m\tau} d\tau = -\frac{e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\beta + i\omega_m\beta} - 1}{\omega_{\vec{q}\lambda} + i\omega_m} \frac{1}{e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\beta} - 1} + \\ &+ \frac{e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\beta + i\omega_m\beta}}{-\omega_{\vec{q}\lambda} + i\omega_m} \frac{1}{e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\beta} - 1} = -\frac{e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\beta} - 1}{\omega_{\vec{q}\lambda} + i\omega_m} \frac{1}{e^{\omega_{\vec{q}\lambda}\beta} - 1} + \frac{e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\beta} - 1}{-\omega_{\vec{q}\lambda} + i\omega_m} \frac{1}{e^{-\omega_{\vec{q}\lambda}\beta} - 1} = \\ &= \frac{2\omega_{\vec{q}\lambda}}{(i\omega_m)^2 - \omega_{\vec{q}\lambda}^2} \end{aligned} \quad (14.45)$$

Получили пропагатор, который можно изобразить следующим образом:

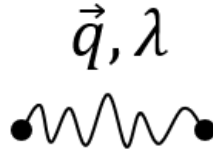


Рис. 14.5. Графическое изображение

Можно составить правило Фейнмана с учетом фононов.

Правило Фейнмана для электрон-фононного взаимодействия

Гамильтониан такого взаимодействия:

$$H_{e-ph} = \sum M a^\dagger a \varphi \quad (14.46)$$

Нам подходят лишь четные степени разложения по числу линий взаимодействия.

Правила:

1. Для порядка $2n$ теории возмущений нужно написать все топологически различные диаграммы из n фоновых и $2n + 1$ фермионных линий. Рассмотрим типичный матричный элемент, который вносит вклад в функцию Грина:

$$\langle T a(\tau) a^+(0) a^+ a \varphi \dots a^+ a \varphi \rangle \quad (14.47)$$

2. Каждой фермионной линии сопоставить известную функцию Грина: $G_0(\vec{k}\sigma, \omega_n)$.
3. Для каждой фоновой линии: $|M_0(\vec{q}\lambda, \omega_m)|$.
4. В каждой вершине сохраняются волновой вектор, частота и спин.
5. Суммировать по степеням свободы.
6. Умножаем на $(-1)^{n+F}$, делим на β^n .

Рассмотрим пример, чтобы увидеть, что изменения незначительные. Рассмотрим второй порядок, что означает, что $n = 1$.

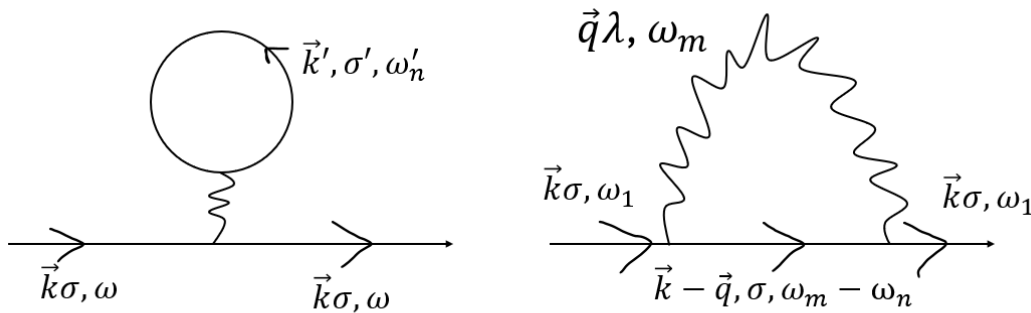


Рис. 14.6. Пример $n = 1$

В левой диаграмме необходимо, чтобы $q = 0$. Тогда

$$M_{q=0} = 0 \quad (14.48)$$

Означает, что эта диаграмма не дает вклад во втором порядке. Для правой диаграммы запишем вклад в функцию Грина:

$$\delta G(\vec{k}\sigma, \omega_n) = \frac{-1}{\beta} \left(G_0(\vec{k}\sigma, \omega_n) \right)^2 \sum_{\vec{q}, -l, m} |M_{\vec{q}\lambda}|^2 D_0(\vec{q}\lambda, \omega_m) G_0(\vec{k} - \vec{q}, \sigma, \omega_n - \omega_m) \quad (14.49)$$

Собственная энергия электрона

В чистом металле время жизни электронного состояния определяется электрон-фононным взаимодействием. Расширенный гамильтониан:

$$\bar{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{q}\lambda} \hbar\omega_{\vec{q}\lambda} \left(a_{\vec{q}\lambda}^{\dagger} a_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\vec{q}\sigma} \sum_{\vec{q}\lambda, q=0} M_{\vec{q}\lambda} a_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{q}\sigma} \Phi_{\vec{q}\lambda} \quad (14.50)$$

Происходит два процесса: поглощение фонона, что увеличивает волновой вектор электрона, и испускание фонона.

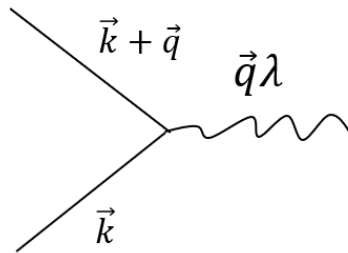


Рис. 14.7. Интерпретация первого из двух входящих вклада

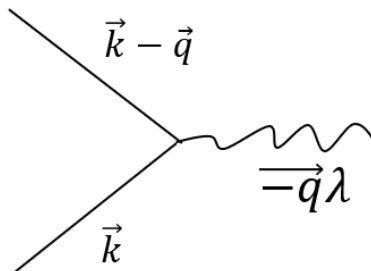


Рис. 14.8. Интерпретация второго из двух входящих вклада

Начнем вычисление в некоторой аппроксимации. С учетом всех взаимодействий сумма электрона представима в виде:

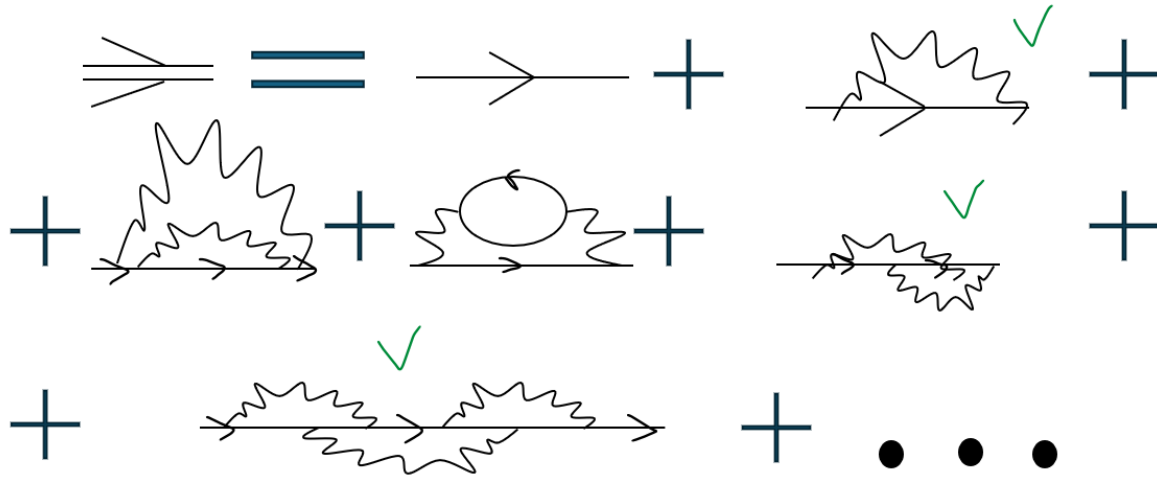


Рис. 14.9. Диаграмма для электрона. 1 вариант

Отмеченные вклады можно не учитывать, поскольку они составляют 1 процент от вкладов без модификаций. Можно воспользоваться другим разложением:

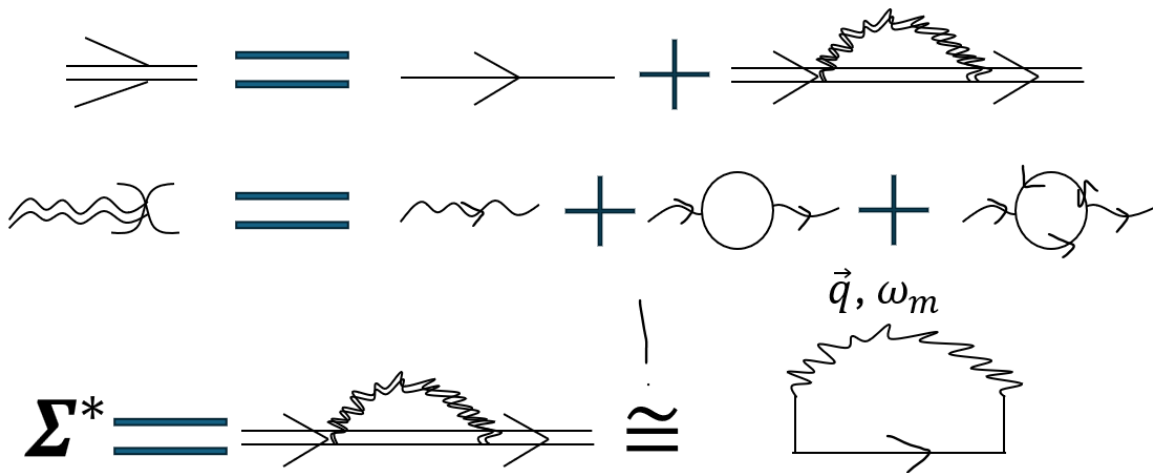


Рис. 14.10. Диаграмма для электрона

Взаимодействующие линии заменяются на свободные – упрощение. Используя правила Фейнмана можно получить:

$$\Sigma^*(\vec{k}\sigma, \omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{q}\lambda} |M_{\vec{q}\lambda}|^2 \sum_m \frac{1}{i\omega_n - i\omega_m - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} \frac{2\omega_{\vec{q}\lambda}}{(i\omega_m)^2 - \omega_{\vec{q}\lambda}^2} \quad (14.51)$$

Собственная энергия электрона (продолжение). Сверхпроводники: Общие свойства. Эффективное электрон-электронное взаимодействие. Куперовские пары. VCS-теория

Описание кристаллов. Продолжение

Собственная энергия электрона. Продолжение

Для собственной энергии оценим диаграмму вида:

$$\begin{aligned}\Sigma^*(\vec{k}\sigma, \omega_n) &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{q}\lambda} |M_{\vec{q}\lambda}|^2 \sum_m \frac{1}{i\omega_n - i\omega_m - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} \frac{2\omega_{\vec{q}\lambda}}{(i\omega_m)^2 - \omega_{\vec{q}\lambda}^2} = \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{q}\lambda} |M_{\vec{q}\lambda}|^2 \sum_m \frac{1}{i\omega_n - i\omega_m - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} \left(\frac{1}{i\omega_m - \omega_{\vec{q}\lambda}} - \frac{1}{i\omega_m + i\omega_{\vec{q}\lambda}} \right)\end{aligned}\quad (15.1)$$

Для решения уравнения распишем справедливое преобразование:

$$\frac{1}{i\omega_n - i\omega_m - \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} \frac{1}{i\omega_m - \omega_{\vec{q}\lambda}} = \frac{1}{i\omega_n \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \omega_{\vec{q}\lambda}} \left(\frac{1}{i\omega_m - \omega_{\vec{q}\lambda}} - \frac{1}{i\omega_m - i\omega_n + \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} \right)\quad (15.2)$$

Найдем сумму:

$$\begin{aligned}\sum_m \frac{e^{i\omega_m 0^+}}{i\omega_m - \omega_{\vec{q}\lambda}} &= \beta G_0(\vec{q}\lambda, 0^-) = \\ &= -\beta \langle T a_{\vec{q}\lambda}(0) a_{\vec{q}\lambda}^+(0^+) \rangle = -\beta \langle a_{\vec{q}\lambda}^+(0^+) a_{\vec{q}\lambda}(0) \rangle = -\beta B(\omega_{\vec{q}\lambda})\end{aligned}\quad (15.3)$$

Исходные суммы сходятся, поэтому не нарушили сходимость при добавлении экспоненты. Получили функцию Грина в мнимом времени. Аналогично можно обработать и второй случай. Различие будет только в знаке.

$$\sum_m \frac{e^{i\omega_m 0^+}}{i\omega_m + \omega_{\vec{q}\lambda}} = -\beta B(-\omega_{\vec{q}\lambda})\quad (15.4)$$

Можно доказать, что

$$B(-\omega) = -1 - B(\omega)\quad (15.5)$$

$$\sum_m \frac{e^{i(\omega_m - \omega_n) 0^+}}{i\omega_m - i\omega_n + \varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}}} = \beta G_0(\vec{k} - \vec{q}\sigma, 0^-) = -\beta \langle T a_{\vec{k}-\vec{q}}(0) a_{\vec{k}-\vec{q}}^+(0^+) \rangle = \beta F(-\varepsilon_{\vec{k}-\vec{q}})\quad (15.6)$$

Аргумент должен стать снова положительным. Распишем конструкцию через явный вид:

$$F(-\varepsilon) = 1 - F(\varepsilon) \quad (15.7)$$

$$\Sigma^*(k\sigma, \omega_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\bar{q}\lambda} |M_{\bar{q}\lambda}|^2 (-\beta) \left(\frac{B(\omega_{\bar{q}\lambda}) + 1 - F(\varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}})}{i\omega_n - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}} - \omega_{\bar{q}\lambda}} - \frac{-1 - B(\omega_{\bar{q}\lambda}) + 1 - F(\varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}})}{i\omega_n - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}} + \omega_{\bar{q}\lambda}} \right) \quad (15.8)$$

Интересно рассмотреть следствие по отношению к времени существования основного состояния фонона. Воспользуемся рецептом по созданию запаздывающей функции Грина:

$$\Sigma^{*R}(\vec{k}\sigma, \omega) = \Sigma^*(\vec{k}\sigma, i\omega_n \longrightarrow \omega + i0^+) \quad (15.9)$$

Воспользуемся следствием формулы Сохоцкого-Племеля:

$$Im \frac{1}{x \pm i0^+} = \mp \pi \delta(x) \quad (15.10)$$

$$Im \Sigma^{*R}(\vec{k}\sigma, \omega) = -\pi \sum_{\bar{q}\lambda} |M_{\bar{q}\lambda}|^2 \left((1 + B(\omega_{\bar{q}\lambda}) - F(\varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}})) \delta(\omega - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}} - \omega_{\bar{q}\lambda}) + (B(\omega_{\bar{q}\lambda}) + F(\varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}})) \delta(\omega - \varepsilon_{\bar{k}-\bar{q}}) \right) \quad (15.11)$$

Легко расписать, что по закону сохранения энергии, два вклада соответствуют испусканию и поглощению фонона. Время жизни содержит мнимую часть от неприводимой части собственной энергии. В нулевом порядке:

$$\tau = \frac{-1}{2Im \Sigma^{*R} \Big|_{\varepsilon_k}} \quad (15.12)$$

Нужно решить уравнение:

$$\omega - \varepsilon_{\bar{k}} - Re \Sigma^{*R}(\vec{k}, \sigma, \omega) = 0 \quad (15.13)$$

Полученное ω подставить выше. Приходится уточнять результат до необходимой точности.

Сверхпроводники

Перейдем к конкретным наблюдаемым эффектам, которые имеют практическую пользу.

Общие свойства

а. Принципиальное свойство – обращение сопротивления в нуль при $T < T_c$. Удельное сопротивление в зависимости от температуры имеет зависимость:

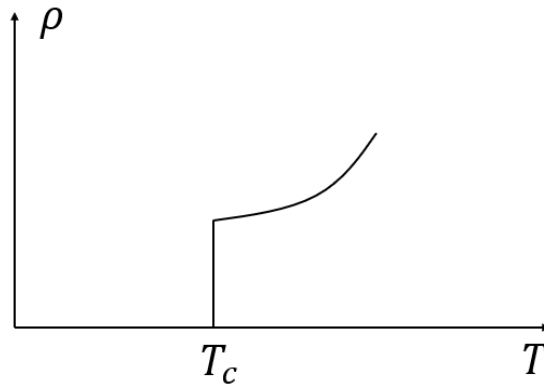


Рис. 15.1. Зависимость удельного сопротивления от температуры

б. Наличие критического магнитного поля. При помещении сверхпроводника в это поле сверхпроводимость разрушается.

В модельном соображении диаграмма аппроксимируется функцией параболического вида. Вне – нормальное состояние. Нанесена функция критического поля от температуры. Происходит фазовый переход между состояниями.

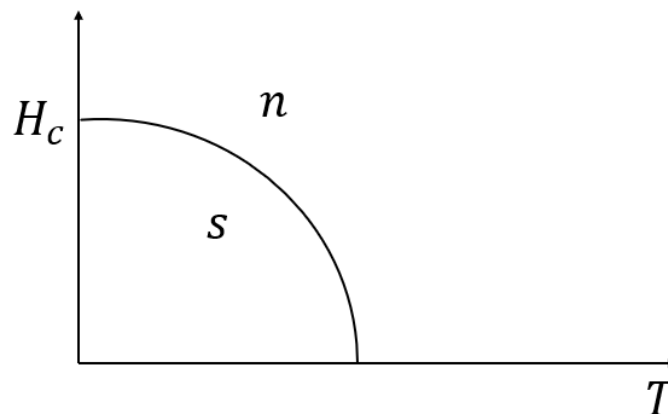


Рис. 15.2. Фазовая диаграмма

в. В идеальном сверхпроводнике отсутствует магнитное поле. Такое явление носит название эффект Мейснера: выталкивание магнитного поля из сверхпроводника.

Эффект открыт в 1933 году. По температуре существует переходная область перемешанных между собой фаз.

г. Поведение теплоемкости. Электронная теплоемкость ведет себя следующим образом: подъем резким пиком, горизонтальный провал, затем линейный рост. Для нормального вещества есть прямая пропорциональность между теплоемкостью и температурой. В нашем случае есть экспериментальная аппроксимация:

$$C_e \sim e^{-\beta\Delta}, \quad \frac{1}{k_B T} = \beta \quad (15.14)$$

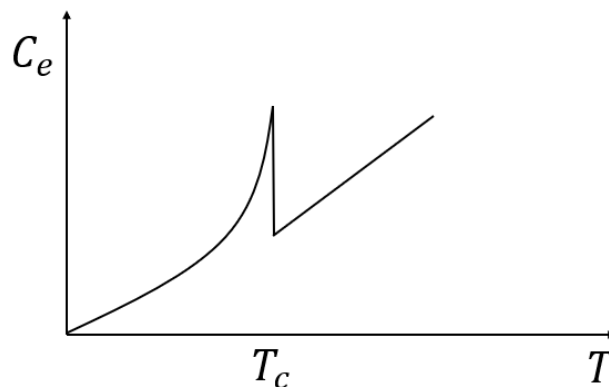


Рис. 15.3. Зависимость C_e от T для сверхпроводника

Это имеет место, если щель между основным состоянием и первым возбужденным состоянием имеет величину 2Δ .

Ток пойдет только если напряжение представляет собой величину $\frac{\Delta}{e}$.

д. Критическая температура зависит от изотопического состава вещества. Это влияет на фононную подсистему. Существенны состояния, связанные с кристаллической решеткой. То есть, электрон-фононное взаимодействие важно в s-состоянии. Эффективное взаимодействие электронов обеспечивается фононами, которые были разобраны в предыдущей главе.

Эффективное электрон-электронное взаимодействие

Электроны без вмешательства других факторов отталкиваются. С учетом диэлектрической среды они продолжают отталкиваться, но слабее из-за поляризации. В присутствие положительных ионов образуется эффект слабого притяжения. Простейшее описание эффекта: рассмотрим ситуацию, в которой в туннель из положительных зарядов влетает электрон. Обеспечивается взаимодействие положительных

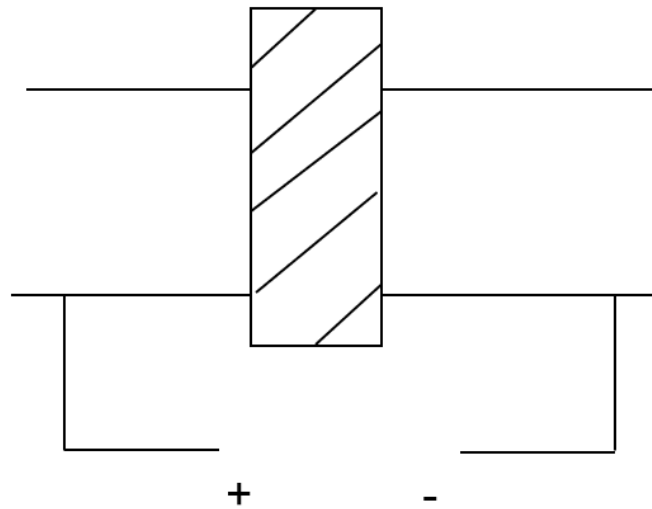


Рис. 15.4. Экспериментальная реализация

зарядов с отрицательным. Происходит смещение к положительному заряду. Пусть электрон очень быстрый. Сформировалась повышенная плотность положительного заряда. На место убежавшего электрона пришел новый электрон, который будет более активно притягиваться в зону более плотного положительного заряда. Имеет место и обратный эффект: положительные плотности тянут электрон назад. То есть, у электронов ускорения направлены в разные стороны.

Оценим некоторые численные характеристики. Время существования фононной волны:

$$\tau_\phi \sim \frac{1}{\omega_D} \sim 10^{-13} \text{ c} \quad (15.15)$$

ω_D – частота Дебая. Используем скорость электрона. Оценим ее по скорости Ферми:

$$v_F \sim 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}} \quad (15.16)$$

$$10^{-13} \text{ c} \cdot 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}} = 1000 \text{ \AA} \quad (15.17)$$

Отталкивание электронов не мешает притяжению.

Рассмотрим распространение двух электронов, которые обмениваются фононом.

$$\tau_\phi v_\phi = 10^{-13} \text{ c} \cdot 10^3 \text{ c} = 1 \text{ \AA} \quad (15.18)$$

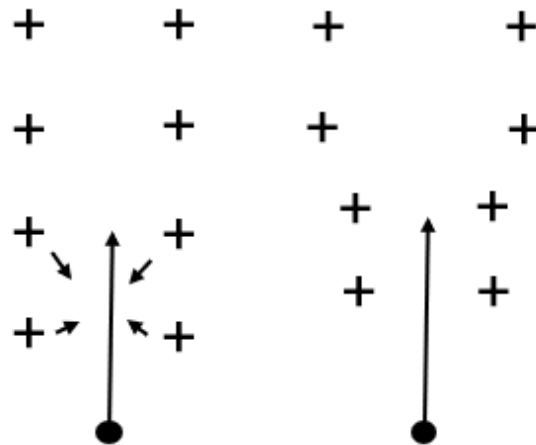


Рис. 15.5. Простейшая ситуация

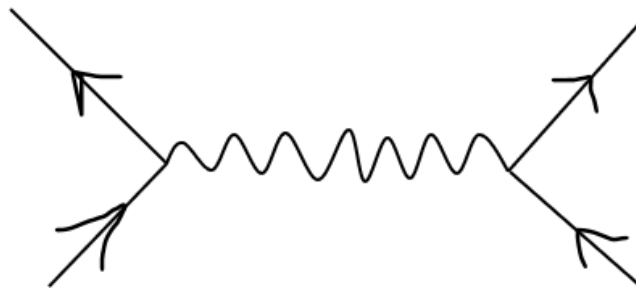


Рис. 15.6. Квантовомеханическая ситуация

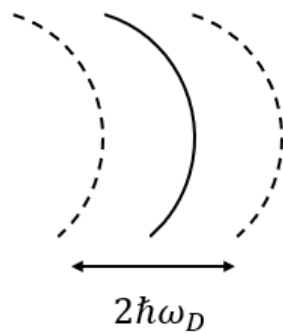


Рис. 15.7. Слой Ферми

Воспользуемся теорией возмущений. Можно составить гамильтониан:

$$H = H_0 + H_{e-ph} \quad (15.19)$$

Электроны будут притягиваться, если они оба принадлежат слою вокруг поверхности Ферми толщиной $2\hbar\omega_D$.

Куперовские пары

Рассмотрим нулевую температуру, под сферой Ферми в основном состоянии заполнены все уровни.

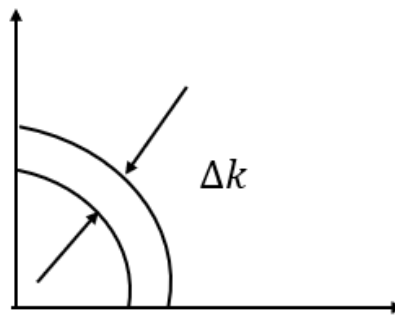


Рис. 15.8. Простейший случай

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \quad (15.20)$$

$$\frac{\hbar^2 k_F}{m} \Delta k = \Delta E \quad (15.21)$$

Учтем притяжение. Учет притяжение был произведен Купером, он рассмотрел взаимодействие электронов как рассеяние электронов с характеристиками $|\vec{k}_1 \sigma_1, \vec{k}_2 \sigma_2 \rangle$ в новое состояние $|\vec{k}_1 + \vec{q}, \sigma_1, \vec{k}_2 - \vec{q}, \sigma_2 \rangle$. Должен быть сохранен импульс:

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{K} = \text{const} \quad (15.22)$$

Сферические области пересекаются в тех местах, где выполнен допуск по энергии и закон сохранения импульса. Рассмотрим максимально возможные области при $K = 0$.

$$\vec{k}_2 = -\vec{k}_1 \quad (15.23)$$

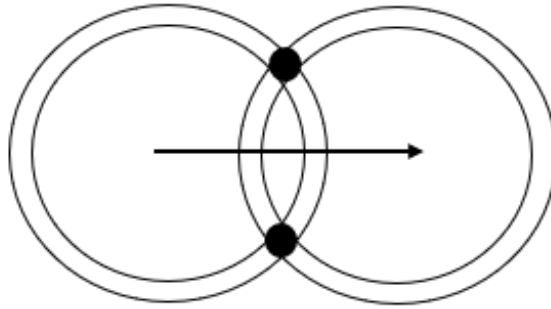


Рис. 15.9. Куперовские пары

Рассеяние приобретает вид:

$$|\vec{k}\sigma_1, -\vec{k}\sigma_2\rangle \longrightarrow |\vec{k}'\sigma_1, -\vec{k}'\sigma_2\rangle \quad (15.24)$$

Запишем стационарное уравнение Шредингера для двух электронов.

$$\left[\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] \Psi(\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2) = E\Psi \quad (15.25)$$

$$\Psi(\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2) = \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) \frac{1}{V} e^{i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \chi(\sigma_1, \sigma_2) \quad (15.26)$$

Нужно искать $g(\vec{k})$. Если оказывается, что $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ антисимметричная функция, то $s = 0$. Тогда

$$g(\vec{k}) = g(-\vec{k}) \quad (15.27)$$

Если же $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ симметричная функция, то $s = 1$. Тогда

$$g(-\vec{k}) = -g(\vec{k}) \quad (15.28)$$

Принципиально, чтобы

$$g(\vec{k}) \neq 0 : E_F < E_{\vec{k}} < E_F + \hbar\omega_D \quad (15.29)$$

$$\sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) \frac{1}{V} (2E_{\vec{k}} + U(\vec{r}) - E) e^{i\vec{k}\vec{r}} = 0 \quad (15.30)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_0 \quad (15.31)$$

Умножаем на $e^{-i\vec{k}'\vec{r}}$ и интегрируем.

$$\int e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{r}} d\vec{r} = V \cdot \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (15.32)$$

Уравнение, которое определяет функцию g :

$$(2E_{\vec{k}'} - E) g(\vec{k}') + \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} U_{\vec{k}'\vec{k}} g(\vec{k}) = 0 \quad (15.33)$$

где

$$U_{\vec{k}'\vec{k}} = \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} \cdot U(\vec{r}) d\vec{r} \quad (15.34)$$

Можно проверить, что

$$U_{\vec{k}'\vec{k}}^* = U_{\vec{k}\vec{k}'} \quad (15.35)$$

$$U(\vec{r}) = U(-\vec{r}) \longrightarrow U_{\vec{k}'\vec{k}} \in \mathbb{R} \quad (15.36)$$

Тогда уточняем явный вид $U_{\vec{k}'\vec{k}}$, после чего можно решать уравнение.

Рассмотрим самую простую модель.

$$U_{\vec{k}'\vec{k}} = \begin{cases} -U_0 < 0, E_F < E_{\vec{k}'}, E_{\vec{k}'} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0, \text{ в остальных случаях} \end{cases} \quad (15.37)$$

Рассмотрим конструкцию

$$(2E_{\vec{k}'} - E) g(\vec{k}') - \frac{U_0}{V} \sum_{\vec{k}} g(\vec{k}) = 0 \quad (15.38)$$

Если функция $g(\vec{k})$ будет нечетной, то есть $s = 1$:

$$E = 2E_{\vec{k}} \quad (15.39)$$

В иной ситуации $s = 0$.

$$1 - \frac{U_0}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2E_{\vec{k}'} - E} = 0 \quad (15.40)$$

$$\sum_{\vec{k}'} \frac{1}{2E_{\vec{k}'} - E} = \int_{E_F}^{E_{\vec{k}} + \hbar\omega_D} \frac{D_\sigma(\varepsilon)}{2\varepsilon - E} d\varepsilon \quad (15.41)$$

$D_\sigma(\varepsilon)$ - функция, которая пересчитывает количество электронов с некой проекцией спина в окрестности ε . Обычно справедливо соотношение

$$\hbar\omega_D \ll E_F \quad (15.42)$$

Тогда

$$\sum_{\vec{k}'} \frac{1}{2E_{\vec{k}'} - E} \approx D_\sigma(E_F) \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{2\hbar\omega_D}{2E_F - E} \right) \quad (15.43)$$

Если решить это уравнение относительно энергии, то можно получить:

$$E = 2E_F - \frac{2\hbar\omega_D}{e^{\frac{2V}{U_0 D \sigma(E_F)}} - 1} \quad (15.44)$$

Такая комбинация называется куперовской парой. Важные замечания:

Даже при слабом притяжении реализуется куперовская пара.

Нет аналитического предела при стремлении U_0 к нулю.

С ростом U_0 энергия связи будет увеличиваться.

BCS теория

1. Притяжение формирует куперовские пары, которые соответствуют состоянию:

$$|\vec{k}, -\vec{k}\rangle \quad (15.45)$$

2. Притяжение приводит к рассеянию, то есть:

$$|\vec{k}', -\vec{k}'\rangle \quad (15.46)$$

Выпишем гамильтониан, который задает суть модели

$$H_{BCS} = \sum_{\vec{k}\sigma} E_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}'}^+ a_{-\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} \quad (15.47)$$

Главное достижение теории:

$$|\Psi\rangle = \prod_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} a_{\vec{k}'}^+ a_{-\vec{k}} \right) |0\rangle \quad (15.48)$$

Предполагается, что

$$u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}} \in \mathbb{R} \quad (15.49)$$

Из нормировки следует:

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1 \quad (15.50)$$

Можно проанализировать возникновение двух электронов для куперовской пары.

Вычислим среднюю энергию.

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = E \quad (15.51)$$

$$H - \mu N \longrightarrow \varepsilon \quad (15.52)$$

$$\bar{E} = 2 \sum_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^2 \varepsilon_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} U_{\vec{k}\vec{k}'} \cdot u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \cdot u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \quad (15.53)$$

Если задачу рассматривать как условный минимум, то можно найти низший уровень энергии. Задача на минимизацию:

$$2\varepsilon_{\vec{k}}u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} + \left(u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2\right) \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} = 0 \quad (15.54)$$

Решение для $v_{\vec{k}}$:

$$v_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \right) \quad (15.55)$$

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \quad (15.56)$$

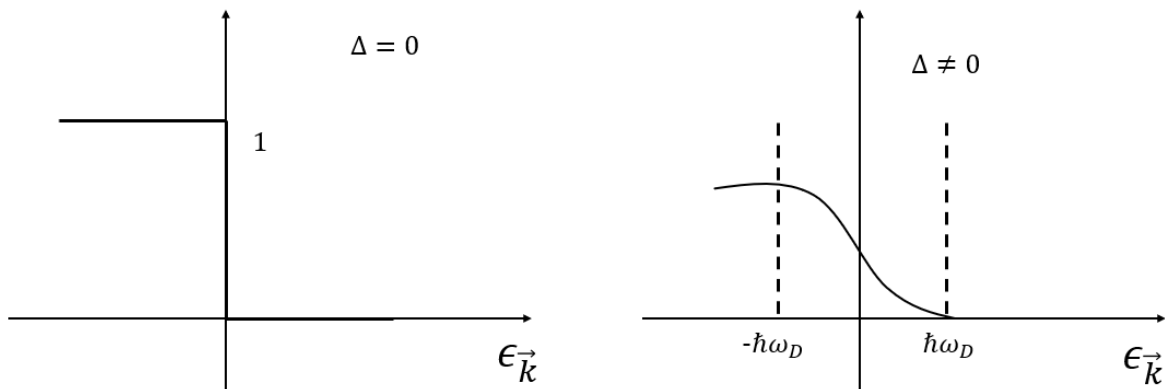


Рис. 15.10. Несколько случаев при различных значениях Δ

Для первого случая:

$$v_{\vec{k}}^2 = \begin{cases} 1, & \varepsilon_{\vec{k}} < 0 \\ 0, & \varepsilon_{\vec{k}} > 0 \end{cases} \quad (15.57)$$

$$\mu = E_F \quad (15.58)$$

Можно ли найти Δ ? Если модель простая, то есть

$$U_{\vec{k}\vec{k}'} = -U_0, E_F < E_{\vec{k}} < E_F + \hbar\omega_0 \quad (15.59)$$

Тогда

$$\Delta_{\vec{k}} = -U_0 \sum_{\vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \varepsilon_{\vec{k}, \varepsilon_{\vec{k}'}} = const = \Delta_0 \quad (15.60)$$

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}}' = - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}'} U_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}'}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \quad (15.61)$$

$$1 = \frac{U_0}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}} \quad (15.62)$$

Получили уравнение на Δ_0 в диапазоне $-\hbar\omega_D < \varepsilon_{\vec{k}} < \hbar\omega_D$. Для решения необходимо заменить суммирование на интегрирование.

$$\frac{U_0}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{D_{\sigma}(\varepsilon) d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta_0^2}} \approx \frac{U_0}{2} D_{\sigma}(E_F) \cdot \operatorname{arsh} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0} \quad (15.63)$$

$$\Delta_0 = \frac{\hbar\omega_D}{sh \frac{1}{U_0 D_{\sigma}(E_F)}} \approx 2\hbar\omega_D e^{\frac{1}{U_0 D_{\sigma}(E_F)}} \quad (15.64)$$

Вычисляем среднюю энергию.

$$\bar{E}_s - \bar{E}_N \approx -\frac{1}{2} D_{\sigma}(E_F) \cdot \Delta_0^2 \quad (15.65)$$

Получилось, что энергетически выгодно перейти в сверхпроводящую фазу. Значит существует спонтанный переход из n в s .

Можно доказать, что

$$[H_{BCS}, \hat{N}] = 0 \quad (15.66)$$

$$|\Psi\rangle = \prod_{\vec{k}} (1 + a^+ a) |0\rangle \quad (15.67)$$

Возникает интересная ситуация: гамильтонан симметрией обладает, а основное состояние – нет. Это называется спонтанное нарушение.

Подход функций Грина. Диаграммный подход. Определение температуры перехода

Сверхпроводники. Продолжение

Подход функций Грина

Базовый расширенный гамильтониан имеет вид:

$$\bar{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} U_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}'}^{\dagger} a_{-\vec{k}'}^{\dagger} a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} = H_0 + H' \quad (16.1)$$

Введем определение для функции Грина

$$G(\vec{k}, \tau) = - \langle T a_{\vec{k}}(\tau) a_{\vec{k}}(0) \rangle \quad (16.2)$$

$$a_{\vec{k}}(\tau) = e^{\bar{H}\tau} a_{\vec{k}} e^{-\bar{H}\tau} \quad (16.3)$$

Запишем уравнение движения. Для этого проведем дифференцирование.

Физический смысл можно узнать, если посмотреть на δ -символы в качестве закона сохранения. Уже знаем, что, чтобы добавить новую частицу, исходное состояние должно быть свободным. v_k^2 – вероятность, что состояние занято, а u_k^2 – вероятность, что состояние свободно. Следующий шаг – пусть куперовское состояние занято, значит $u_k^2 = 0, v_k^2 = 1$. Пик приходится на второй δ -символ. Имеем энергетическую щель, которая в данных единицах может быть получена как $2\Delta_0$. Получили различие между свободным и занятым состояниями. Нужно развить диаграммную технику.

Диаграммный подход

Начнем с уравнения Дайсона, которое записывается в виде:

$$G(\vec{k}, \omega_n) = G_0(\vec{k}, \omega_n) + G_0(\vec{k}, \omega_n) \cdot \Sigma^*(\omega_n) \cdot G(\vec{k}, \omega_n) \quad (16.5)$$

Это работало, когда сохранялось число частиц, но теперь мы добавили аномальные функции F, F^+ . Ввод дили такое определение, что если в вершину входит стрелка, то такая стрелка сопоставима оператору рождения, если исходит – то оператору

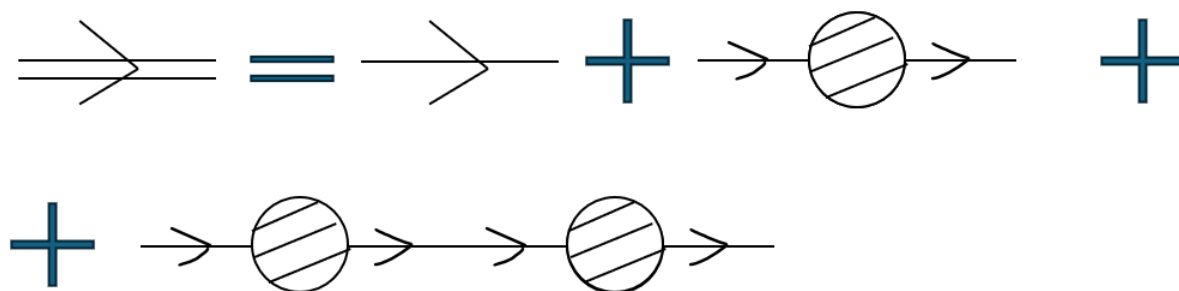


Рис. 16.1. Диаграмма, когда число частиц сохраняется

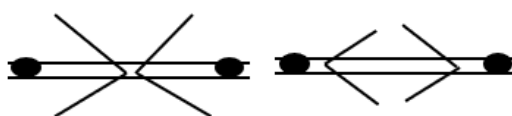


Рис. 16.2. Новая диаграмма

уничтожения. Здесь графически функцию F^+ можно изобразить следующим образом:

Любой диаграмме теперь могут соответствовать собственные энергии, которые привязаны к диаграмме при помощи стрелок, направленных в разные стороны.

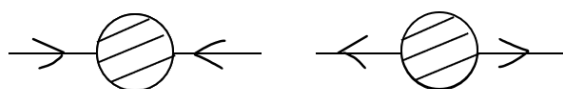


Рис. 16.3. Новая диаграмма

Полная функция Грина для взаимодействующей системы с учетом сверхпроводящего состояния будет иметь вид в виде диаграммы:

Приведена диаграмма без учета нормальных состояний. Нет учета этих сдвигов, поскольку они могут быть посчитаны и без учета сверхпроводимости. Увидим, где тут общая функция F^+ .

Пренебрежем поправками от нормальных состояний. Можно сказать, что

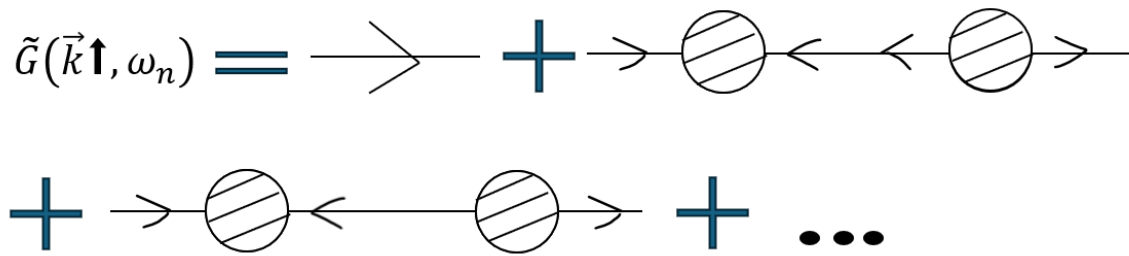


Рис. 16.4. Полная функция Грина для взаимодействующей системы с учетом сверхпроводящего состояния

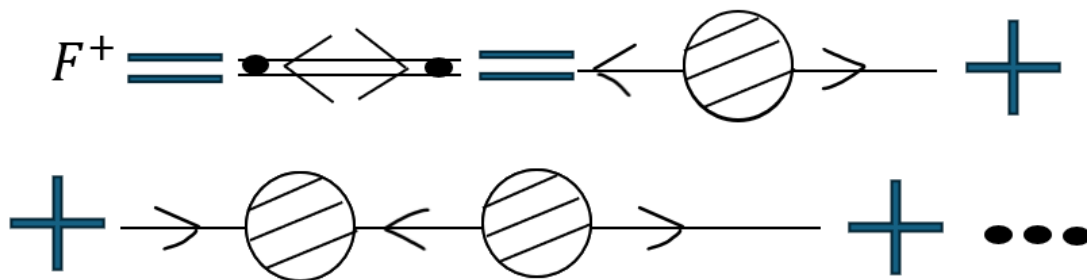


Рис. 16.5. Диаграмма для F^+

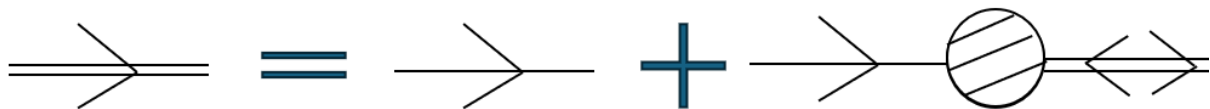


Рис. 16.6. Диаграмма для $G(\vec{k}, \tau)$

$$G(\vec{k}, \tau) = G_0(\vec{k}, \tau) + \int_0^\beta d\tau_1 G_0(\vec{k}, \tau - \tau_1) F^+(\vec{k}, \tau_1) \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}\vec{k}} F(\vec{q}, 0) \quad (16.6)$$

$$F^+(\vec{k}, \tau) = - \int_0^\beta d\tau_1 G_0(-\vec{k}, \tau_1 - \tau) G(\vec{k}, \tau_1) \sum_{\vec{q}} U_{\vec{k}\vec{q}} F^+(\vec{q}, 0) \quad (16.7)$$

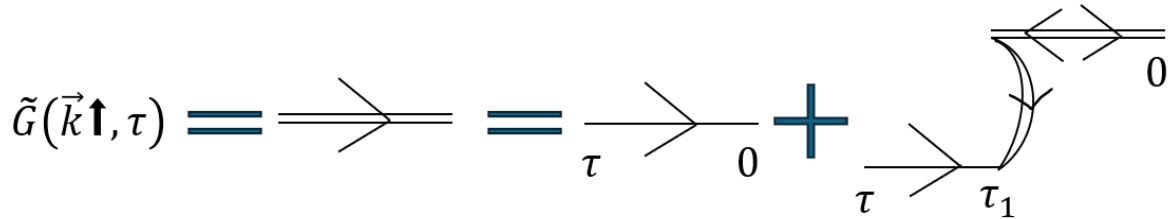


Рис. 16.7. Диаграмма для $G(\vec{k}, \tau)$

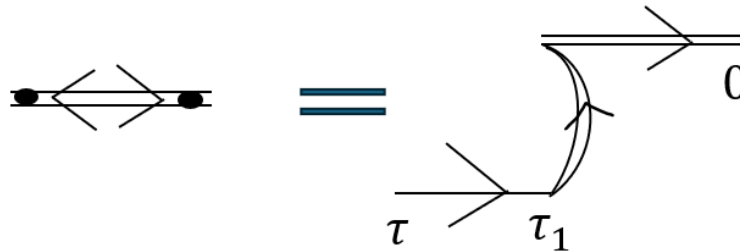


Рис. 16.8. Диаграммный вид

Замечание

$$G = G_0 - \Delta_{\vec{k}} G_0 - F^+ \quad (16.8)$$

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}\vec{k}} F(\vec{q}, 0) \quad (16.9)$$

Знак минус правильный, он соответствует уравнению, которое уже получали. Для второй строчки:

$$F^+ = \Delta_{\vec{k}}^* G_0 G \quad (16.10)$$

Из этих наборов функций Грина можно извлечь практические результаты.

Определение температуры перехода

Имеется ввиду фазовый переход из сверхпроводящего состояния в нормальное и обратно. Модель:

$$U_{\vec{k}\vec{q}} = \begin{cases} -U_0, & -\hbar\omega_D < \varepsilon_{\vec{k}}, \varepsilon_{\vec{q}} < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} \quad (16.11)$$

В этом случае

$$\Delta = \Delta_0 = \text{const} \quad (16.12)$$

$$\frac{U_0}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{1 - 2F(E_{\vec{k}})}{E_{\vec{k}}} = 1 \quad (16.13)$$

$$F(E_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta E_{\vec{k}}} + 1} \quad (16.14)$$

Энергия должна быть в некотором диапазоне:

$$\varepsilon_{\vec{k}} < \hbar\omega_D \quad (16.15)$$

Перейдем от суммирования к интегрированию.

$$\frac{U_0}{2} D_{\sigma}(E_{\vec{k}}) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\text{th}\left(\frac{\beta\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}}{2}\right)}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_0|^2}} d\varepsilon = 1 \quad (16.16)$$

В некотором приближении рассчитаем интеграл. Возьмем нулевую температуру $T = 0$, тогда

$$\Delta_0 = \frac{\hbar\omega_D}{sh \frac{1}{U_0 D_{\sigma}(E_F)}} \quad (16.17)$$

Условие на фазовый переход из нормальной фазы в сверхпроводящую:

$$\Delta(T_c) = 0 \quad (16.18)$$

$$1 = U_0 D_{\sigma}(E_F) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\text{th}\left(\frac{\beta\varepsilon}{2}\right)}{\varepsilon} d\varepsilon = U_0 D_{\sigma}(E_F) \int_0^{\theta} \frac{\text{th}x}{x} dx \quad (16.19)$$

Здесь

$$x = \frac{\beta\varepsilon}{2} \quad (16.20)$$

Интеграл берется по частям.

$$\int_0^{\theta} \frac{thx}{x} dx = \ln x thx \Big|_0^{\theta} - \int_0^{\theta} \frac{1}{ch^2 x} \ln x dx \quad (16.21)$$

Учтем, что связь слабая, то есть температура намного больше, чем характерная энергия в системе. Тогда

$$th\theta \approx 1 \quad (16.22)$$

$$\theta \gg 1 \quad (16.23)$$

Тогда:

$$\ln x thx \Big|_0^{\theta} - \int_0^{\theta} \frac{1}{ch^2 x} \ln x dx = \ln \theta - \int_0^{\infty} \frac{1}{ch^2 x} \ln x dx \quad (16.24)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{1}{ch^2 x} \ln x dx = \ln \frac{\pi}{4} - 0.577 \quad (16.25)$$

Таким образом:

$$\frac{1}{U_0 D_{\sigma}(E_F)} = \ln \frac{\beta c \hbar \omega_D}{2} - \ln \frac{\pi}{4} + \gamma \quad (16.26)$$

$$\beta_c^{-1} = \frac{2}{\pi} e^{\gamma} \hbar \omega_D e^{-\frac{1}{U_0 D_{\sigma}(E_F)}} = K_B T_c \quad (16.27)$$

Оценили критическую температуру.



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ