

Х. Одночастичная функция Грина. (Невзаимодействующие фермионы.)

*Мотоциклы, циклопы, клопы.
Толя «Дюрантон», МФТИ, 1962
Все смешалось в доме Облонских.
Л.Н. Толстой, Анна Каренина.*

10.1 Почему, для чего и как?

В предыдущих главах мы смогли в простейших случаях приближенно найти отклик взаимодействующей электронной системы на внешнее воздействие и определить энергию основного состояния. При этом возникли две проблемы, одна из которых очень тяжелая: реальные эксперименты оказались выполнены вне области применимости расчета. Однако даже там, где все должно бы было быть в порядке (в области малых r_s), вычисления не имели прочной базы, поскольку их уточнение по теории возмущений ведет к появлению расходимостей во всех порядках теории возмущений, выше первого.

Нам бы хотелось найти систематический метод для вычисления энергии основного состояния, энергий и времен жизни элементарных возбуждений во взаимодействующем электронном газе. Такой метод был изначально развит в квантовой теории поля, а затем перенесен на физику твердого тела. Главную роль в этом методе играют новые функции – функции Грина, которые имеют простой физический смысл, через которые могут быть выражены искомые физические характеристики системы, и, наконец, которые могут быть вычислены с помощью одного из регулярных методов, в частности, с помощью метода, опирающегося на физическую интуицию.

Мы стартуем с одночастичной функции Грина. Она непосредственно определяет времена жизни квазичастиц, позволяет вычислить распределение частиц по импульсам, спинам и определить энергию основного состояния системы. Для нахождения коллективных возбуждений, транспортных характеристик, магнитной проницаемости и т.д., используется двухчастичная функция Грина, к рассмотрению которой мы перейдем в конце курса.

Как же вычисляются столь полезные функции? Первый метод (не рассматриваемый ниже) состоит в построении цепочки дифференциальных уравнений. При этом оказывается, что одночастичная функция Грина выражается через двухчастичную. Уравнение для двухчастичной функции Грина содержит трехчастичную и т.д. Обычно эту цепочку разрывают, делая, например, какое-нибудь приближение для двухчастичной функции и решая уравнение для одночастичной функции Грина.

Альтернативный метод, рассматриваемый ниже, состоит в разложении функции Грина в ряд теории возмущений, зависящих от времени. Полученный ряд, к сожалению, сходится так медленно, что его нельзя оборвать на конечном члене. Поэтому используется частичное или выборочное суммирование. Во всех порядках суммируют «главные» члены определенного типа вплоть до бесконечного порядка. Несмотря на то, что иногда все члены суммируемого ряда бесконечны, сумма оказывается конечной. Это и есть метод диаграммной техники.

Моей целью не является обучение счету с помощью диаграммной техники. Задача состоит в том, чтобы научиться понимать и оценивать теоретические работы, выполненные этой техникой. Мы все знаем, что совсем не нужно быть виртуозом, да и вообще не нужно уметь играть на музыкальных инструментах для того, чтобы слушать и ценить музыку.

10.2 Словесное определение запаздывающей одночастичной функции Грина.

Давайте вспомним, как вводилась функция Грина в курсе уравнений математической физики. При этом полезно помнить, чем занимался тот самый Грин, именем которого названа функция. Он решал уравнение Пуассона с целью отыскания статического электрического поля в среде с распределенными зарядами:

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho(\mathbf{r}). \quad (10.1)$$

Как известно, благодаря принципу суперпозиции полей, решение этого уравнения может быть записано в виде интеграла:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \rho(\mathbf{r}') |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1} = \int d^3r' G(\mathbf{r},\mathbf{r}') (-4\pi\rho(\mathbf{r})), \quad (10.2)$$

где мы ввели функцию Грина для рассматриваемой задачи

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = (-4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)^{-1} \quad (10.3)$$

Мы видим, что использование функции Грина сводит в данном конкретном случае задачу о потенциале системы зарядов к решению задачи о потенциале одного заряда.

Аналогичным способом выписывают решения других краевых задач. Для уравнения $L\psi(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t)$ с линейным дифференциальным оператором L функция Грина задается как решение уравнения

$$LG(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \delta(t-t'). \quad (10.4)$$

Нам осталось заметить, что уравнение Шредингера относится к рассматриваемому классу уравнений в связи с чем использование функции Грина для многофермионных задач должно сводить проблему эволюции системы многих, вообще говоря взаимодействующих, частиц к одночастичной проблеме. Как мы увидим ниже, оставшиеся частицы не будут полностью безучастны к этой эволюции.

Для ясной физической интерпретации нам удобно начать не с формул, а со словесного определения функции Грина в случае уравнения Шредингера.. Определение, которое дано ниже, не будет универсальным. Позже мы его еще уточним.

Итак, запаздывающей одночастичной функцией Грина (пропагатором) называется амплитуда плотности вероятности того, что если в момент t_1 в систему в основном состоянии добавлена частица в точку \mathbf{r}_1 то в момент $t_2 > t_1$ система будет находиться в основном состоянии с избыточной частицей в точке \mathbf{r}_2 .

Обозначается эта амплитуда как $iG^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1)$. Здесь мнимая единица введена для удобства, а знак «+» показывает, что $t_2 > t_1$. Естественно, что в силу неразличимости частиц, в точке \mathbf{r}_2 должна обнаруживаться произвольная частица системы. Амплитуда вероятности задает, как всегда, плотность вероятности:

$$P(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) = G^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) * G^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1). \quad (10.5)$$

По определению, при $t_2 \leq t_1$

$$iG^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) = 0. \quad (10.6)$$

Часто бывает более удобным работать с функцией Грина, определенной не через собственные функции оператора координаты $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)$, (слова «добавлена частица в точку \mathbf{r}_1 »), а через произвольные одночастичные функции $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, плоские волны, например.

Соответственно, назовем запаздывающей одночастичной функцией Грина $iG^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1)$ амплитуду вероятности того, что если в систему в основном состоянии в момент времени t_1 добавлена частица в состоянии $\phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$, то в момент $t_2 > t_1$ система будет находиться в основном состоянии с избыточной частицей в состоянии $\phi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})$.

В качестве примера вычислим свободную функцию Грина G_0^+ , характеризующую систему в отсутствие возмущений и взаимодействия. В начальный момент времени

избыточная частица описывается функцией $\phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r})$. В момент t_2 она имеет вид $\phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) \exp(-i\varepsilon_{\mathbf{k}_1}(t_2-t_1))$, где $\varepsilon_{\mathbf{k}_1}$ – одночастичная энергия, соответствующая импульсу \mathbf{k}_1 . Искомая амплитуда вероятности задана проекцией волновой функции в момент t_2 на состояние $\phi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r})$:

$$\int d^3r \phi_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) \exp(-i\varepsilon_{\mathbf{k}_1}(t_2-t_1)) = \exp(-i\varepsilon_{\mathbf{k}_1}(t_2-t_1)) \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1}. \quad (10.7)$$

Следовательно,

$$G^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2-t_1) = -i \theta_{t_2-t_1} \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} \exp(-i\varepsilon_{\mathbf{k}_1}(t_2-t_1)) = G^+(\mathbf{k}_1, t_2-t_1) \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1}; \quad (10.8)$$

$t_2 > t_1$, $G^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2-t_1) = 0$ при $t_2 = t_1$. Наконец, поскольку система фермиевская, а температура предполагается нулевой, $\varepsilon_{\mathbf{k}_1} > \varepsilon_F$.

Фурье образ по частоте от свободной функции Грина имеет вид:

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} d(t_2-t_1) \theta_{t_2-t_1} \exp(-i\varepsilon_{\mathbf{k}}(t_2-t_1)) \exp(i\omega(t_2-t_1)) = (-1)(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1*}$$

$$\exp[i(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})(t_2-t_1)] \Big|_0^{\infty} = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1} - i\pi\delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta)^{-1}. \quad (10.9)$$

(Чтобы понять последний переход в (10.9), см. (5.24)).

Фурье-образ свободной функции Грина имеет полюс при частоте, равной энергии добавленной частицы.

Задача: С помощью (10.9) вычислить координатную запаздывающую функцию Грина свободной частицы $G^+(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega)$.

Решение: $G^+(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) = (2\pi)^{-3} \int d^3k \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')) (\omega - k^2/2m + i\eta)^{-1} = m(4\pi^3)^{-1} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} k^2 dk \exp(ikR \cos\theta) (\kappa^2 - k^2 + i\delta)^{-1} =$ интегрируем по углам $= m(2\pi^2)^{-1} \int_0^{\infty} k^2 dk (ikR)^{-1} (\exp(ikR) - \exp(-ikR)) (\kappa^2 - k^2 + i\delta)^{-1} = -m/2 (2\pi^2 iR)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp(ikR) \{(k - (\kappa + i\delta'))^{-1} + (k + (\kappa + i\delta'))^{-1}\}.$

Здесь введены обозначения $R = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, $\kappa^2 = 2m\omega$, $\delta' = \delta/2\kappa$. Поскольку $R > 0$, мы замкнем контур для вычисления интеграла полуокружностью в верхней полуплоскости и получим:

$$G^+(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) = -m/(2\pi) \exp(ikR) R^{-1}.$$

Решение соответствует расходящейся сферической волне.

Полюсы фурье-образа одночастичной функции Грина появляются при значениях ω , равных разности энергии возбужденных состояний системы из $N+1$ взаимодействующих частиц и энергии основного состояния системы из N частиц.

Речь здесь идет, естественно, об элементарных возбуждениях ферми-жидкости.

При наличии взаимодействия мы будем рассматривать квантовые квазичастицы с энергией $\varepsilon'_{\mathbf{k}}$, во всем подобные обычным частицам, за исключением конечного времени жизни. Одночастичная функция Грина будет очень похожа на свободную функцию Грина:

$$G^+_{\text{квазичаст}}(\mathbf{k}, \omega) = (\omega - \varepsilon'_{\mathbf{k}} + i\tau_{\mathbf{k}}^{-1})^{-1}. \quad (10.10)$$

Обнаружение у системы частиц функции Грина типа (10.9) эквивалентно введению квазичастиц. Естественно, что ширина энергетических уровней должна быть малой $\tau_{\mathbf{k}}^{-1} \ll \varepsilon'_{\mathbf{k}}$.

Проверим, что введенное нами определение функции Грина, по крайней мере в случае свободной функции Грина, соответствует определению, принятому в теории уравнений математической физики (см. 10.4).

В отсутствие взаимодействия и внешних полей уравнение Шредингера имеет вид:

$$\{(2m)^{-1} \nabla^2 + i \partial / \partial t\} \psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (10.11)$$

Поэтому уравнение (10.4) приобретет форму:

$$\{(2m)^{-1} \nabla^2 + i \partial / \partial t\} G(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \delta(t-t'). \quad (10.12)$$

После координатного преобразования Фурье

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{x}', t-t') = \int (2\pi)^{-3} d^3k \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')) G(\mathbf{k}, t-t'), \quad (10.13)$$

уравнение (10.12) переходит в

$$\{-(2m)^{-1} k^2 + i \partial / \partial t\} G(\mathbf{k}, t-t') = \delta(t-t'). \quad (10.14)$$

Пользуясь равенствами

$$d\theta(x)/dx = \delta(x) \quad \text{и} \quad f(x) \delta(x) = \delta(x) f(0),$$

убеждаемся, что (10.8) действительно является решением (10.14).

Задача: Прodelать промежуточные вычисления, демонстрирующие, что (10.8) является решением уравнения (10.14).

При наличии взаимодействия одночастичная функция Грина интегрального уравнения $(E-p^2/2m)\varphi(\mathbf{p}) + \int V(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \varphi(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} = 0$, имеет вид, аналогичный (10.10)

$$G^+(\Omega, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum \varphi_n^*(\mathbf{p}') \varphi_n(\mathbf{p}) [\Omega - E_n + i\eta]^{-1}, \quad (10.15)$$

где φ_n и E_n – собственные функции и значения энергии.

В заключение этого параграфа еще раз выпишем все известные нам представления запаздывающего пропагатора свободно движущейся частицы:

Представление:

Ответ:

импульс – время

$$G^+_0(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1) = -i \theta_{t_2 - t_1} \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} \exp(-i\varepsilon_{\mathbf{k}_1} (t_2 - t_1)),$$

импульс -энергетический параметр

$$G^+_0(\mathbf{k}, \omega) = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\eta)^{-1},$$

координата- энергетический параметр

$$G^+_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) = -m/(2\pi) \exp(i\kappa R) R^{-1}. \quad (10.16)$$

10.3 Пример диаграммного разложения функции Грина.

В качестве первого примера возможности графического представления бесконечного ряда для функции Грина рассмотрим свободный невзаимодействующий газ фермионов во внешнем возмущающем потенциале

$$V(\mathbf{p}) = M p^2. \quad (10.17)$$

Подобное возмущение может возникнуть, например, при рассмотрении движения центра масс «составного» фермиона из двух частиц с массами m_1 и m_2 . Действительно, одночастичный гамильтониан в этом случае имеет вид

$$H = p^2/2(m_1 + m_2) = p^2/2m_1 - (p^2/2m_1)(m_2/(m_1 + m_2)), \quad (10.18)$$

где второй член может рассматриваться как наше возмущение (10.17).

Мы проведем рассмотрение дважды: в начале базируясь, в основном, на физической интуиции, а затем формально.

Функция Грина $iG^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1)$ может быть вычислена как сумма амплитуд вероятностей для всех путей, переводящих систему из состояния с избыточной частицей \mathbf{k}_1 в момент t_1 в состояние \mathbf{k}_2 . Суммирование амплитуд начнем с члена, в котором взаимодействие с потенциалом (10.17) не существенно. Амплитуда вероятности этого члена описывается свободной функцией Грина $G^+_0(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1)$. Другая возможность состоит в том, чтобы свободно двигаться до некоторого момента t_M , в этот момент рассеяться в состояние \mathbf{k}_2 , а затем снова двигаться свободно. Таким образом, амплитуда второго пути представима в виде произведения трех амплитуд, две из которых являются свободными функциями Грина $iG^+(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1, t_M - t_1)$ и $iG^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2, t_2 - t_M)$, а третья задана выражением (3.5):

$$(da_{\mathbf{k}_2}/dt) = (i)^{-1} a_{\mathbf{k}_1}(t_M) V_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} \exp(i(\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1})(t_M - t_0)).$$

Поскольку до рассеяния в момент $t_M = t_0$ амплитуда $a_{\mathbf{k}_1} = 1$, то амплитуда вероятности перехода в единичный интервал времени

$$(da_{k2}/dt)^*1 = -i a_{k1} V_{k2,k1} = -i \int d^3 \mathbf{r} \phi_{k2}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{p}) \phi_{k1}(\mathbf{r}) = -i M k^2 \delta_{k2,k1}.$$

Чтобы найти полную амплитуду вероятности по второму пути, нужно произведение трех амплитуд просуммировать по всем возможным временам t_M . Следующий член суммы будет включать в себя двукратное рассеяние на возмущающем потенциале и, следовательно, двойной интеграл по временам от произведения пяти множителей и т.д..

После сокращения на мнимую единицу имеем следующий ряд для функции Грина:

$$G^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1) = G^+_0(\mathbf{k}, t_2 - t_1) + \int dt_M G^+_0(\mathbf{k}, t_M - t_1) V_{k,k} G^+_0(\mathbf{k}, t_2 - t_M) + \int dt_M \int dt_{M'} \dots + \dots \quad (10.19)$$

Этот ряд представим в виде суммы диаграмм. Для их построения изобразим свободную функцию Грина $iG^+_0(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = \theta_{t_2 - t_1} \exp(-i\varepsilon_k(t_2 - t_1))$ сплошной линией со стрелкой так, как это показано на рис. 27.

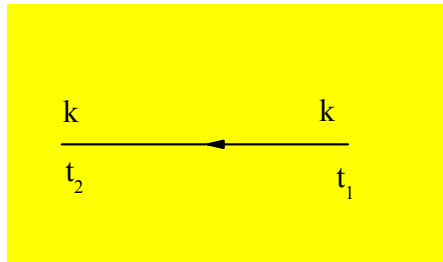


Рис. 27.

Матричный элемент перехода из состояния l в состояние m изобразим так, как это показано на рис. 28

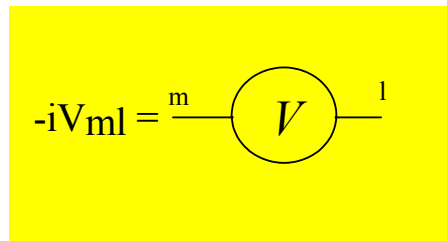


Рис. 28.

Ряд (10.18) изобразится следующей диаграммой:

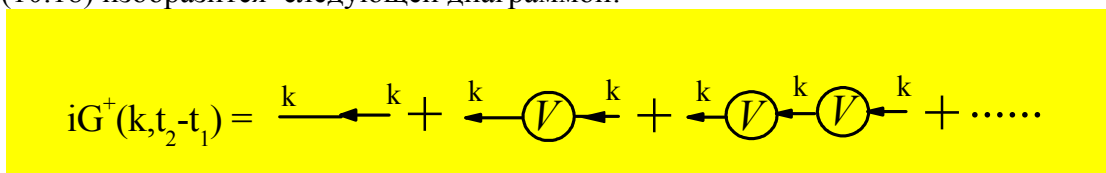


Рис.29.

Одновременно рис.29 может быть отнесен и к фурье-образам (поэтому мы специально не поставили на рисунке времена). Каждая из сверток на языке фурье-образов соответствует произведению, поэтому рис.29 может быть представлен следующей формулой:

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = G^+_0 + (G^+_0)^2 V_{kk} + (G^+_0)^3 V_{kk}^2 + \dots = G^+_0 (1 - G^+_0 V_{kk})^{-1} = [(G^+_0)^{-1} - V_{kk}]^{-1}. \quad (10.20)$$

Последнее равенство справедливо для $|G^+_0 V_{kk}| < 1$.

$$G^+(\mathbf{k}, \omega) = (\omega - \varepsilon_k + i\delta - V_{kk})^{-1} = [\omega - (\varepsilon_k + M k^2) + i\delta]^{-1}. \quad (10.21)$$

Как мы видим, взаимодействие с внешним потенциалом привело к появлению «одетых» частиц (квазичастиц) с бесконечным временем жизни и массой, равной $m_1 + m_2$. Конечно, в нашем примере этот результат можно было легко предсказать без всяких вычислений.

Не прозевайте: Наши результаты справедливы только при $|G_0^+ V_{kk}| < 1$, однако (10.21) имеет полюса! В окрестности полюсов G_0^+ ряд должен бы расходиться. Мы будем считать, тем не менее, что выражение для функции Грина справедливо и в окрестности полюса, т.е. примем «гипотезу исчезновения неприятных расходимостей».

Теперь проделаем то же разложение в ряд (10.19) формально. Пусть возмущающий потенциал имеет, как и в нашем примере, вид $V(\nabla)$. Уравнение Шредингера (10.14) приобретет вид

$$\{-(2m)^{-1} k^2 + i \partial / \partial t - V(k)\} G(\mathbf{k}, t-t') = \delta(t-t'). \quad (10.22)$$

Его решение может быть записано в виде интегрального уравнения (10.23), в чем можно убедиться прямой подстановкой.

$$G^+(\mathbf{k}, t-t') = G_0^+(\mathbf{k}, t-t') + \int dt'' G_0^+(\mathbf{k}, t-t'') V(k) G^+(\mathbf{k}, t''-t'). \quad (10.23)$$

При условии $|G_0^+ V(k)| < 1$, уравнение (10.23) решается итерациями:

$$G^+(\mathbf{k}, t-t') = G_0^+(\mathbf{k}, t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt'' G_0^+(\mathbf{k}, t-t'') V(k) G_0^+(\mathbf{k}, t''-t') + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' dt''' G_0^+ V G_0^+ V G_0^+ + \dots \quad (10.24)$$

Что точно совпадает с разложением (10.19).

10.4 Опережающая или дырочная функция Грина.

Дыркой мы, согласно п.3.5, называли пустое, не заполненное место под ферми-уровнем. Энергия дырки была отрицательна

$$\varepsilon_{\text{дыр}}^k = -\varepsilon_k.$$

Зависимость от времени волновой функции в состоянии ϕ_k

$$\psi(t)^{\text{дыр}} = \phi_k \exp(-i(-\varepsilon_k t)).$$

Теперь свяжем изменение знака в экспоненте не с энергией, а с временем, т.е. будем рассматривать дырку как частицу, распространяющуюся в обратную сторону по времени! Тогда мы можем обобщить определение функции Грина на времена $t_2 < t_1$.

Назовем опережающей одночастичной функцией Грина $iG^-(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2-t_1)$ взятую с обратным знаком амплитуду вероятности того, что если из системы в основном состоянии в момент времени t_2 удалена частица в состоянии $\phi_{k_2}(\mathbf{r})$, то в момент $t_1 > t_2$ система будет находиться в основном состоянии с недостающей частицей в состоянии $\phi_{k_1}(\mathbf{r})$.

$$-iG^-(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2-t_1)_{t_2 > t_1} = 0.$$

По аналогии с тем, как это было сделано выше, не составляет труда выписать выражение для свободной дырочной функции Грина и ее фурье-образа:

$$G_0^-(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2-t_1) = i \theta_{t_1-t_2} \exp(-i\varepsilon_{k_1}(t_2-t_1)) \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} \quad \text{при } t_2 \neq t_1, \varepsilon_k < \varepsilon_F \\ = i \quad \text{при } t_2 = t_1. \quad (10.25)$$

$$G_0^-(k, \omega) = (\omega - \varepsilon_k - i\eta)^{-1} \quad (10.26)$$

Специально отметим, что в системе взаимодействующих частиц запаздывающая функция Грина будет определена и при $\varepsilon_k > \varepsilon_F$, а опережающая при $\varepsilon_k < \varepsilon_F$ (см. рис.8).

До сих пор мы в качестве примера выбирали такой возмущающий гамильтониан, который сохранял импульс. Теперь пришла пора рассмотреть более общий случай. Соответствующий диаграммный ряд для функции G^+ показан на рис.30. Все обозначения

на этом рисунке такие же, как прежде. Точка означает взаимодействие с внешним возмущающим потенциалом. Как видно из рисунка, первые три диаграммы совпадают с диаграммами рис.29. Начиная с четвертой диаграммы ситуация усложняется. Эта диаграмма должна быть интерпретирована так: в момент времени t' рождается дырка с импульсом l и электрон с импульсом k_2 , дырка аннигилирует с электроном k_1 в момент времени $t > t'$.

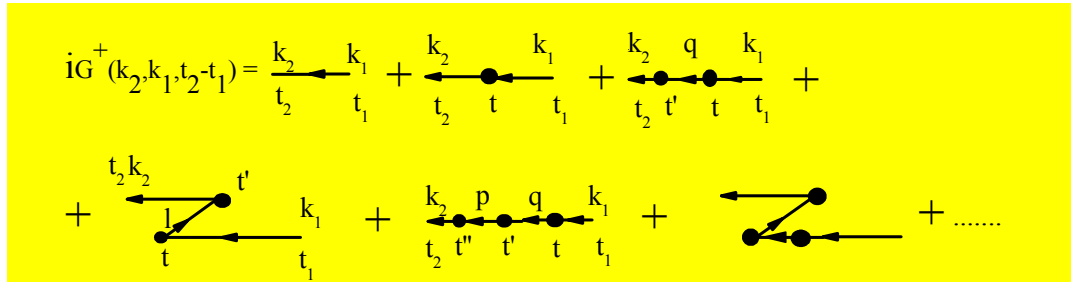


Рис. 30.

Изображенный диаграммный ряд без труда переводится на язык формул:

$$G^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_2 - t_1) = G_0^+(\mathbf{k}_1, t_2 - t_1) \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} + \int_{-\infty}^{\infty} dt G_0^+(\mathbf{k}_2, t_2 - t) V_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} G_0^+(\mathbf{k}_1, t - t_1) + \sum_{\epsilon(q) > \epsilon_F} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \dots + \dots \quad (10.27)$$

Не прозевайте: Области интегрирования в (10.27) ограничиваются θ функциями. Тем не менее, для устранения проблем на бесконечности приходится заменить пределы интегрирования на $\pm\infty(1-i\eta)$, где η – положительная, бесконечно малая величина.

Фурье-образ функции Грина 10.27 имеет вид:

$$G^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \omega) = \delta_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} G_0^+(\mathbf{k}_1) + G_0^+(\mathbf{k}_1) V_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1} G_0^+(\mathbf{k}_2) + \sum_{\epsilon(q) > \epsilon_F} G_0^+(\mathbf{k}_1) V_{q, \mathbf{k}_1} G_0^+(\mathbf{q}) V_{\mathbf{k}_2, q} G_0^+(\mathbf{k}_2) + \sum_{\epsilon(l) < \epsilon_F} G_0^+(\mathbf{k}_1) V_{l, \mathbf{k}_1} G_0^-(\mathbf{l}) V_{\mathbf{k}_2, l} G_0^+(\mathbf{k}_2) + \dots \quad (10.28)$$

Задача: Вычислить $G^+(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \omega)$ в случае $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_1$ для потенциала, у которого велики только матричные элементы V_{km} и V_{mk} , $\epsilon(m) < \epsilon_F$.

Решение: Решение показано на рис.31. Указанное решение содержит одну проблему: начиная со второй, диаграммы содержат участки, противоречащие принципу Паули (два или более электронов в одном состоянии одновременно). Тем не менее, такие диаграммы нужно учитывать (запомните!). В нашем случае решение можно найти тривиально, непосредственным решением уравнения Шредингера и сравнить ответы. Из-за подобных проблем с интерпретацией теории часто вообще отказываются от качественной интуитивной интерпретации диаграмм, предпочитая рассматривать правила формального разложения.

См. также задачу п.3.4.

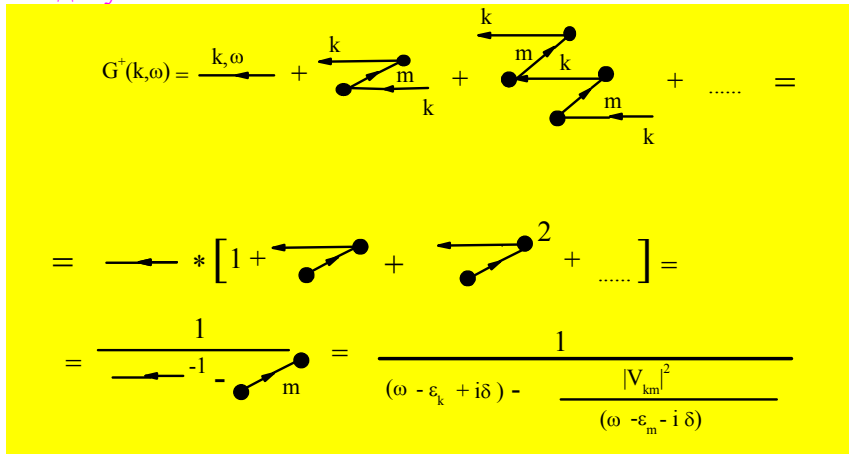


Рис. 31.

XI. Одночастичная функция Грина. (Взаимодействующие фермионы.)

-Смотрите, это месяц-
Зевнув, сказал один.
Другой сказал: - Тарелка!-
А третий крикнул: - Блин!
С.Маршак.

11.1 Определение одночастичной функции Грина математическим выражением.

Данное ранее словесное определение очень удобно для интуитивных представлений, но математика требует формального формульного определения. Кроме того, было бы удобно иметь не два отдельных определения (для запаздывающей и для опережающей функций Грина), а одно универсальное. Сформулируем его.

Прежде всего выберем базис одноэлектронных волновых функций (плоские волны, например) и на его основе определим операторы рождения и уничтожения квазичастиц (см. п.3.5):

$$\begin{aligned} c_i &= \theta_{k_i-k_F} a_i + \theta_{k_F-k_i} b_i^+, \\ c_i^+ &= \theta_{k_F-k_i} a_i^+ + \theta_{k_i-k_F} b_i. \end{aligned} \quad (11.1)$$

После чего запишем эти операторы в представлении Гейзенберга:

$$\begin{aligned} c_{i_1}^+(t_1) &= \exp(iHt_1) c_{i_1}^+ \exp(-iHt_1), \\ c_{i_2}(t_2) &= \exp(iHt_2) c_{i_2} \exp(-iHt_2); \end{aligned} \quad (11.2)$$

где H – гамильтониан системы с взаимодействием. Для того, чтобы заменить словесное выражение формулой, нам придется ввести еще один новый оператор – оператор упорядочения во времени:

$T[A(t_1) B(t_2) \dots] = (-1)^P$ * Произведение операторов перегруппированных так, что время уменьшается слева направо (если никакие времена не совпадают)

$T[A(t_1) B(t_2) \dots] = (-1)^P$ * Произведение операторов перегруппированных так, что в случае совпадающих времен операторы c^+ стоят слева от операторов c .

Здесь P – число перестановок, требующихся для установления операторов в нужном порядке.

Задача: Выписать $T[c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^+(t_1)]$ для случаев $t_2 > t_1$ и $t_2 \leq t_1$.

Определим теперь одночастичную функцию Грина следующим выражением

$$G(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | T[c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^+(t_1)] | \Psi_0 \rangle. \quad (11.3)$$

Здесь Ψ_0 точная волновая функция системы из N взаимодействующих частиц. Более подробно (11.3) может быть переписано в виде:

$$\begin{aligned} G &= G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | c_{k_2}(t_2) c_{k_1}^+(t_1) | \Psi_0 \rangle, & t_2 > t_1. \\ G &= G^-(k_2, k_1, t_2 - t_1) = i \langle \Psi_0 | c_{k_1}^+(t_1) c_{k_2}(t_2) | \Psi_0 \rangle, & t_2 \leq t_1. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Теперь нам нужно убедиться, что математическое определение (11.3) эквивалентно данному ранее словесному. Рассмотрим в качестве примера запаздывающую функцию Грина ($t_2 > t_1$).

$$G^+(k_2, k_1, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | \exp(iHt_2) c_{k_2} \exp(-iH(t_2 - t_1)) c_{k_1}^+ \exp(-iHt_1) | \Psi_0 \rangle.$$

Величина $\exp(-iHt_1) |\Psi_0\rangle$ представляет собой волновую функцию основного состояния в момент времени t_1 , соответственно, $c_{k_1}^+ \exp(-iHt_1) |\Psi_0\rangle$ представляет собой состояние, полученное добавлением к основному в момент t_1 избыточной частицы. Наконец,

$$\exp(-iH(t_2-t_1)) c_{k_1}^+ \exp(-iHt_1) |\Psi_0\rangle \quad (11.5)$$

есть волновая функция системы в момент t_2 при условии, что в t_1 к основному состоянию добавлена избыточная частица. Волновая функция системы с избыточной частицей в состоянии k_2 в момент времени t_2 :

$$c_{k_2}^+ \exp(-iHt_2) |\Psi_0\rangle \quad (11.6)$$

Комплексно сопряженная функция имеет вид

$$\langle \Psi_0 | \exp(iHt_2) c_{k_2},$$

Следовательно, в соответствии со словесным определением, (11.3) есть не что иное, как проекция (11.5) на (11.6).

11.2 Гамильтониан и графическое представление взаимодействия.

Теперь нам предстоит сделать очень важный шаг – научиться работать с взаимодействующими частицами. Для этого нам нужно выработать правила графического изображения взаимодействия. Вспомним описывающий взаимодействие гамильтониан (3.35):

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{klmn > k_F} V_{klmn} a_l^+ a_k^+ a_m a_n + \frac{1}{2} \sum_{klm > k_F, n < k_F} V_{klmn} a_l^+ a_k^+ a_m b_n^+ + \dots + \frac{1}{2} \sum_{klmn < k_F} V_{klmn} b_l^+ b_k^+ b_m b_n, \quad (11.7)$$

где матричный элемент V_{klmn} задан выражением

$$V_{klmn} = V_{lknm} = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \phi_m(\mathbf{r}') \phi_n(\mathbf{r}). \quad (11.8)$$

Каждый из выписанных членов гамильтониана содержит четыре оператора и, следовательно, может быть интерпретирован как рассеяние двух квазичастиц друг на друге с образованием двух новых квазичастиц. Процессы взаимодействия, описываемые (11.7), можно изобразить в виде диаграмм, показанных на рис. 32. Сам процесс взаимодействия в некоторый момент времени показан вертикальной волнистой линией.

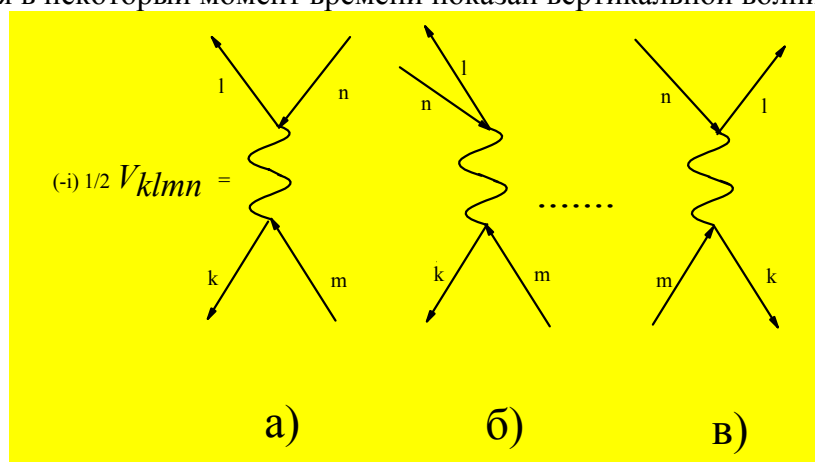


Рис.32.

Собственно говоря, уже в способе изображения взаимодействия нами заложено предположение о его мгновенности. Мы не будем обсуждать, насколько это предположение правильно, отметив, что для заряженных частиц оно может быть обосновано значительным превышением скоростью света всех остальных скоростей.

Каждая из диаграмм рис.32 соответствует одному из членов гамильтониана (11.7). Диаграмма а), например соответствует рассеянию двух частиц m и n друг на друге с образованием частиц k и l . Диаграмма б) описывает рассеяние квазичастицы-дырки n на частице m с образованием частиц k и l , и т.д.

Необходимо запомнить порядок индексов: m -линия, входящая в нижнюю вершину, n –линия входящая в верхнюю вершину; соответственно, k - линия, выходящая из нижней вершины, а l –из верхней. Мы предполагаем, что взаимодействие зависит только от модуля разности координат частиц и, поэтому сохраняет импульс и спин в системе. Импульс, втекающий в точку взаимодействия, равен импульсу, вытекающему из нее. Закон сохранения импульса удобно включить в диаграммы так, как это показано на рис.33. Закон сохранения импульса вместе с требованием о невозможности существования частицы и дырки в одном состоянии (частицы только выше, а дырки – только ниже ферми уровня) накладывает сильные ограничения на число и форму возможных диаграмм. Так в первом порядке (один акт взаимодействия) возможны всего четыре диаграммы, показанных в верхней части рис.34.

Возможные вклады в функцию Грина от процессов первого порядка показаны в нижней части рис.34. Две левые диаграммы (так называемые «пузыри») соответствуют следующему процессу: частица с импульсом k в результате взаимодействия выбивает частицу из состояния l под уровнем ферми и мгновенно возвращает ее в то же состояние. Такие процессы называются процессами рассеяния вперед. Соответствующий процесс

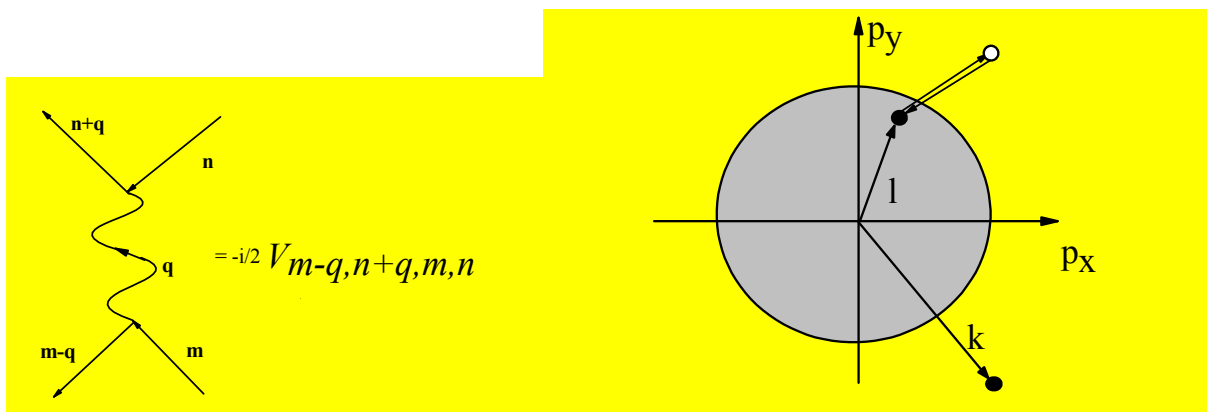


Рис.33.

в импульсном пространстве показан в правой части рис.33.

Вклад в функцию Грина от «пузыря», изображенного в левой нижней части рис.34 равен:

$$(-1) \sum_{l < k_F} \int_{-\infty}^{\infty} dt [iG_0^+(\mathbf{k}, t-t_1)] [-i/2 V_{klkl}] [iG_0^-(\mathbf{l}, t-t)] [iG_0^+(\mathbf{k}, t_2-t)] \quad (11.9)$$

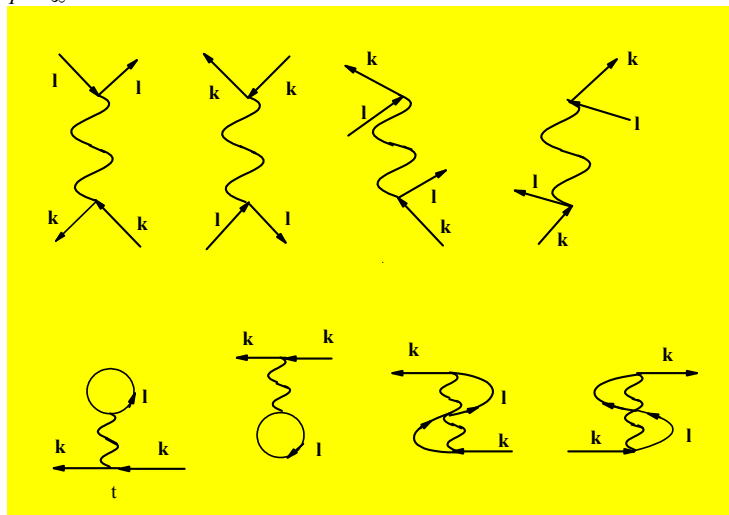


Рис.34.

Это выражение построено по тем же правилам, что и ранее. Однако, перед суммой введен дополнительный множитель (-1). Этот множитель не может быть получен из простых соображений и является результатом точного разложения функции Грина. Следует просто запомнить, что дополнительный множитель (-1) соответствует каждой фермионной петле на диаграмме. Такой петлей мы будем называть любую комбинацию сплошных линий на диаграмме, двигаясь по которой можно вернуться в исходную точку. Легко также догадаться, что предпоследний сомножитель в (11.9) также равен (-1). Действительно,

$$i\bar{G}_0(\mathbf{l}, t-t) = i*i \exp(-i\varepsilon_l*0) = -1.$$

Не представляет труда выписать выражение для фурье-образа (11.9).

$$(-1) [iG_0^+(\mathbf{k}, \omega)]^2 \sum_{l < k_F} [-i/2 * V_{klkl}] (-1)$$

Для перевернутого « пузыря» мы получим аналогичное выражение с матричным элементом $V_{klkl}=V_{kklk}$. Поэтому из двух пузырьковых диаграмм рис.34 мы можем учитывать только одну, опуская множитель $1/2$ перед матричным элементом.

Обратимся теперь к двум оставшимся диаграммам в нижней части рис.34. Такие диаграммы называют открытыми устрицами. Иногда их схематически изображают так, как это показано на рис.35.

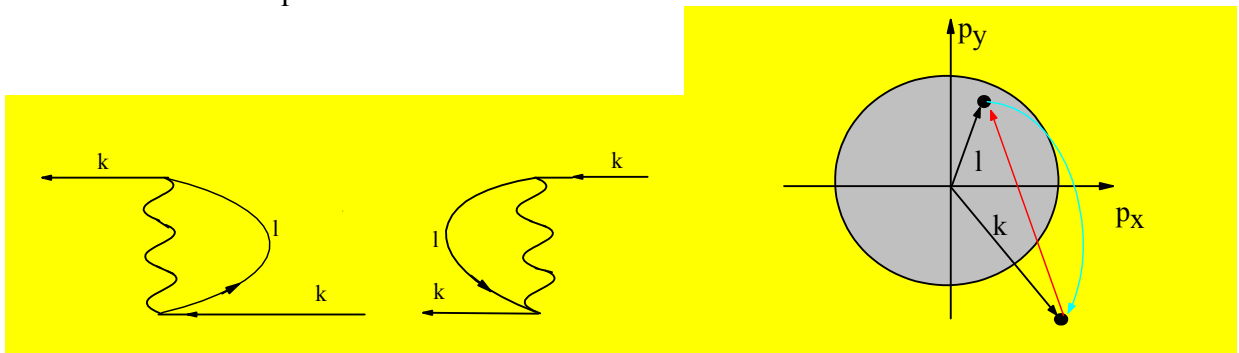


Рис.35

Физическая интерпретация таких диаграмм состоит в следующем: в момент t частица \mathbf{k} выбивает на мгновение частицу \mathbf{l} из под ферми уровня, меняется с ней местами, после чего состояние \mathbf{l} под ферми уровнем вновь заполняется. (См. правую часть рис.35.) Такие диаграммы называют обменными. Мгновенные дырочные линии в пузырях и в открытых устрицах называются нераспространяющимися.

Из сказанного ясно, что и в случае с взаимодействием мы собираемся представлять функцию Грина в виде ряда теории возмущений. Каждый член ряда может быть истолкован как описание некоторого, вообще говоря, виртуального процесса. Поскольку гамильтониан взаимодействия не зависит от времени, то энергетический параметр, фигурирующий в фурье-образе функции Грина сохраняется. В отличие от энергетического параметра, энергия частиц на каждой из диаграмм, описывающих один из виртуальных процессов, не сохраняется. Отметим специально, что введенная в замкнутую систему энергия, естественно сохраняется и даже если дробится, то сумма частей равна исходной избыточной энергии (этому утверждению и соответствует сохранение энергетического параметра. Энергия же виртуальных частиц, рождаемых под воздействием заданной частоты, никак не связана с этой частотой. Именно в этом смысле нужно понимать утверждение о несохранении энергии. Сохранение энергетического параметра удобно учесть на диаграммах в (\mathbf{k}, ω) пространстве:

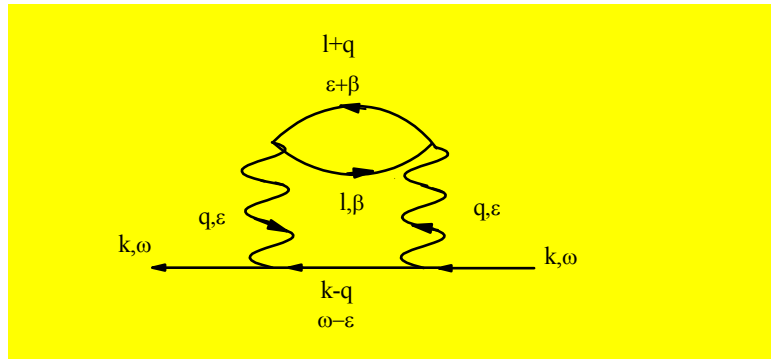


Рис.36.

Теперь нам пришла пора составить таблицу-шпаргалку по переводу диаграмм на язык формул и обратно.

Функция Грина	$iG^\pm(k, t_2-t_1)$	$iG^\pm(k, \omega)$
Свободная	$iG_0^+ = \theta_{t_2-t_1} e^{-i\varepsilon_k(t_2-t_1)} \leftarrow \begin{array}{c} t_2 \\ t_1 \\ k \end{array}$ $iG_0^- = -\theta_{t_1-t_2} e^{-i\varepsilon_k(t_2-t_1)} \begin{array}{c} t_2 \\ t_1 \\ k \end{array} \rightarrow$	$iG_0^+(k, \omega) = \frac{i}{\omega - \varepsilon_k + i\delta} \leftarrow \begin{array}{c} k, \omega \end{array}$ $iG_0^-(k, \omega) = \frac{i}{\omega - \varepsilon_k - i\delta} \begin{array}{c} k, \omega \end{array} \rightarrow$
Нераспространяющаяся линия	$iG_0^-(k, t_2-t_1) = -1 \quad \begin{array}{l} k < k_F \\ 0 < k > k_F \end{array}$	
	<p>Множитель (-1) от каждой фермионной петли.</p> $-iV_{klmn} \text{ или } -iV_q$	
	<p>Суммирование по промежуточным k и интегрирование по промежуточным временам.</p>	<p>Суммирование по промежуточным k и интегрирование по промежуточным частотам ($d\omega/2\pi$).</p>

Обратите внимание, что множитель $\frac{1}{2}$, фигурировавший на рис.33, исчез. Это связано с тем, что каждую из диаграмм, а не только пузырь или устрицу, можно перевернуть вверх ногами.

11.3 Квазичастицы в приближении Хартри-Фока.

Рассмотрим спектр системы фермионов, у которых максимальны два типа матричных элементов взаимодействия

$$V_{klmn} = \delta_{mk} \delta_{nl} V_{klkl} + \delta_{ml} \delta_{nk} V_{kllk} + \text{малые члены.} \quad (11.10).$$

Сравнивая (11.10) с рис.33, мы приходим к выводу, что для плоских волн первый член связан с нулевой передаче импульса, а во втором, $\mathbf{n} + \mathbf{q} = \mathbf{m}$. Последнее точно соответствует приближению, сделанному в п.п. 4.1б, 7.1 и 7.2. Специально отметим, что приближение Хартри-Фока соответствовало учету только рассеяния вперед (первый член в (11.10)) и

обменного взаимодействия (второй член в (11.10)), но не сводилось, вообще говоря, к первому порядку теории возмущений. На диаграммном языке (10.11) означает, что нам нужно для нахождения функции Грина просуммировать бесконечный ряд диаграмм, содержащий «пузыри» и открытые устрицы. Процесс суммирования соответствующих диаграмм показан на рис. 37.

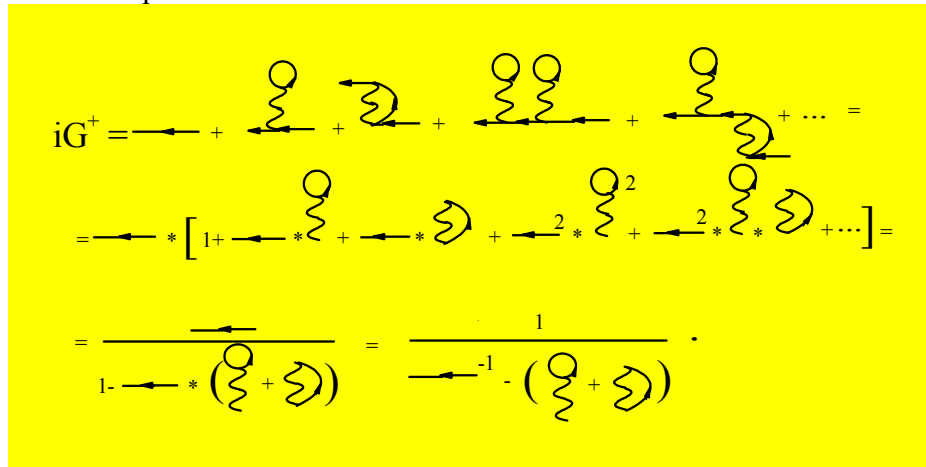


Рис. 37.

Бросается в глаза сходство диаграмм рис.37 с диаграммами рис.29 или рис.31. Сходство это не случайно и означает, что приближение Хартри-Фока эквивалентно введению некоторого эффективного поля, создаваемого всеми частицами системы в точке расположения пробной частицы. Последняя диаграмма на рис.37 легко переводится на язык формул:

$$G^+(k, \omega) = \{\omega - \varepsilon_k - \sum_{l < k_F} (V_{klkl} - V_{lkkl}) + i\delta\}^{-1}. \quad (11.11)$$

Как мы помним, такой вид имеет функция Грина квазичастиц с энергией

$$\varepsilon_k = \varepsilon_k + \sum_{l < k_F} (V_{klkl} - V_{lkkl}) \quad (11.12)$$

и бесконечным временем жизни. Если индексы k и l рассматривать как отмечающие неизвестные собственные функции, то можно для этих функций составить уравнение Шредингера, включающее эффективный потенциал и определить самосогласованные решения (вспомним процедуру самосогласования, рассматривавшуюся нами для приближения Хартри-Фока ранее). Плоские волны удовлетворяют этому уравнению автоматически. Для кулоновского взаимодействия, как это мы уже обсуждали ранее, $V_{klkl} = 0$. В (11.12) остается только вклад от обменного члена и масса квазичастиц обращается в нуль (см. п.7.2). Если член в круглых скобках в знаменателе на рис. 37 является малым, то функция Грина может быть вычислена как поправка первого порядка теории возмущений.

Появление нулевой массы связано с тем, что в приближении Хартри-Фока влияние всех остальных частиц на пробную частицу сводится к некоторому среднему полю. Приближение Хартри-Фока позволяет учесть статическую часть облака, окружающего пробную частицу, но не учитывает, что облако может следовать за ней. В результате, взаимодействие между частицами оказывается не экранированным. Эффект экранирования, естественно, связан с корреляциями в движении частиц ферми системы. Чтобы учесть эти корреляции нам необходимо учесть ранее отброшенные как малые оставшиеся диаграммы в функции Грина. Сделать это точно невозможно, но мы можем учесть самые главные из отброшенных диаграмм.

Задача: На диаграмме, изображенной на рис.38, вдоль всех линий проставить значения импульса и энергетического параметра, подобно тому, как это сделано на рис.36.

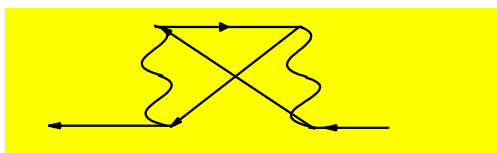


Рис.38

11.4 Еще раз о квазичастицах.

В предыдущем тексте мы пользовались понятием «квазичастица» в фермиевской жидкости в двух несколько различных смыслах. Во-первых, это было в случае квазичастиц ферми жидкости Ландау. При этом предполагалось, что число квазичастиц равно числу исходных частиц и при нуле температуры они заполняют все состояния внутри ферми сферы. Тем не менее, предполагалось, что реально наблюдаемы такого рода квазичастицы только вблизи ферми-поверхности (из-за конечности времени жизни). Более того, энергия основного состояния не вычислима в этой модели и ни в коем случае не равна сумме энергий заполняющих сферу Ферми квазичастиц. Ландауовские квазичастицы могли переходить в результате возбуждения в состояния над ферми-сферой, образуя пустые места внутри ее. При этом появляются возбуждения электронного и дырочного типа – квазичастицы во втором смысле, использованном нами. Описание на языке электронно-дырочных возбуждений имеет смысл только пока число квазичастиц мало по сравнению с числом частиц в системе. Кроме того, оно справедливо только вблизи ферми-уровня и на сравнительно больших временах (голая частица одевается облаком за конечное время). Более подробно мы рассмотрим свойства квазичастиц на простом примере, в котором предполагается, что только рассеяние вперед дает заметный вклад в энергию взаимодействия между частицами (хартриевский член во взаимодействии доминирует). Как уже упоминалось, такого не может быть в случае свободного электронного газа с кулоновским взаимодействием. Встает естественный вопрос, есть ли в природе хоть один объект, в котором такое взаимодействие превалирует. Предполагается, например, что это происходит в ядерной материи.

Собственно говоря, энергию электронных возбуждений для рассматриваемого примера мы уже вычислили. Она задана выражением (11.12), в котором под суммой нужно оставить только один член содержащий V_{kkl} . В случае дырок нам следует суммировать диаграммы, изображенные на рис. 39. Следует специально отметить, что на всех суммируемых диаграммах $k \neq l$. (Проверьте это утверждение.)

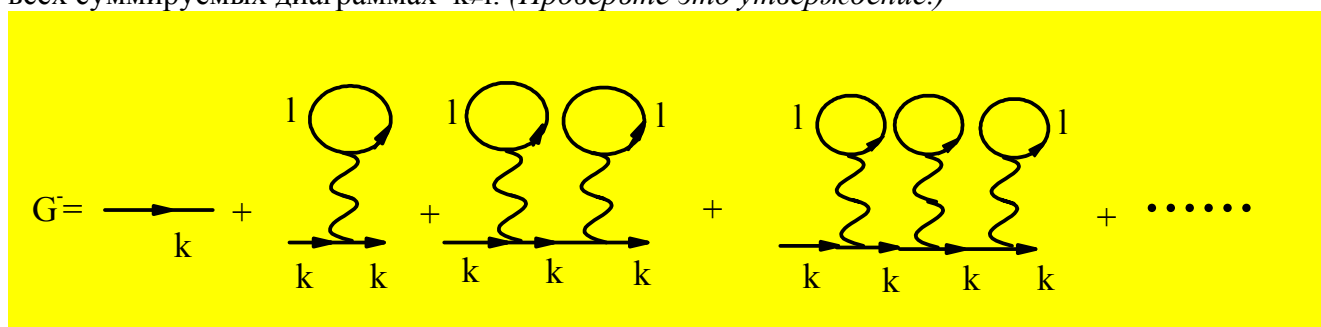


Рис.39.

Следовательно, энергия дырочных возбуждений записывается в виде:

$$\epsilon_k' = \epsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{kkl}. \quad (11.13)$$

В результате, гамильтониан нашей модельной системы может быть представлен в форме:

$$H = H_0 + \sum_{k > k_F} (\epsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{kkl}) A_k^+ A_k - \sum_{k < k_F} (\epsilon_k + \sum_{l < k_F} V_{kkl}) B_k^+ B_k + f(\dots A_k \dots A_k^+ \dots B_k \dots). \quad (11.14)$$

Знак «-» перед третьим членом суммы поставлен потому, что энергия дырок отрицательна. Последний член суммы описывает остаточное взаимодействие между частицами, а H_0 –соответствует гамильтониану основного состояния.

Пусть наша система находится в возбужденном состоянии

$$|\psi\rangle = |1^p_{k_1}, 1^p_{k_2}, 1^p_{k_n}, 1^h_{l_1}, 1^h_{l_2}, \dots, 1^h_{l_n}\rangle.$$

Здесь индексы p и h соответствуют электронным и дырочным возбуждениям. Сравним вклад в энергию от квазичастиц каждого типа и от члена, описывающего взаимодействие между квазичастицами. Ясно, что квазичастичный подход будет справедлив только, если последний член мал.

$$\langle \psi | (\sum_{k>k_F} \varepsilon'_k A^+_k A_k) | \psi \rangle = n (\langle \varepsilon_k \rangle + N \langle V \rangle). \quad (11.15)$$

$$\langle \psi | f | \psi \rangle = n^2 \langle V \rangle. \quad (11.16)$$

Если взаимодействие достаточно сильно и в (11.15) можно пренебречь средней энергией частиц $\langle \varepsilon_k \rangle$ по сравнению с энергией взаимодействия, то отношение (11.16) к (11.15) равно просто отношению числа возбуждений к числу частиц в системе. Этот пример показывает, почему число квазичастиц должно быть малым по сравнению с полным числом частиц в системе: $n \ll N$.

Вернемся теперь к другому ограничению на картину квазичастиц. Нами уже неоднократно упоминалось, что обратное время жизни квазичастиц должно быть мало по сравнению с расстоянием между квазичастичными уровнями, т. е. заведомо должно удовлетворяться

$$\tau_k^{-1} \ll \varepsilon'_k - \varepsilon_F.$$

Оценим время жизни квазичастицы. С этой целью оценим вероятность рассеяния квазичастицы из состояния k за счет столкновения с другими частицами. Пусть процесс рассеяния состоит в столкновении с частицей в состоянии $|\mathbf{k}_2| \leq k_F$ и переходе в состояния \mathbf{k}_3 и \mathbf{k}_4 ($|\mathbf{k}_3| > k_F$, $|\mathbf{k}_4| > k_F$). Закон сохранения импульса дает:

$$\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3. \quad (11.17)$$

Вероятность перехода пропорциональна

$$W \propto \int d^3k_2 \int d^3k_3 |V_{k_3, k_1+k_2-k_3, k_1, k_2}|^2. \quad (11.18)$$

Причем вследствие сохранения энергии

$$k^2_1 + k^2_2 = k^2_3 + k^2_4 \quad (11.19)$$

следовательно, $k^2_1 + k^2_2 \geq 2 k^2_F$.

Рассмотрим сначала случай $|\mathbf{k}_1| = k_F$. В этом случае импульсы всех четырех частиц лежат на ферми-сфере. Теперь предположим, что $k_1 = k_F + \delta$, где $k_F \gg \delta > 0$. Тогда $k_2 \geq k_F - \delta$. Чтобы выполнялся закон сохранения энергии, необходимо импульсы рассеянных частиц также расположить в шаровом слое толщины δ вблизи фермиевского импульса. Каждый из интегралов по k_2 и k_3 в (11.18) дает множитель, пропорциональный $k^2_F \delta$. А значит,

$$\tau_k^{-1} \propto \delta^2 \propto (\varepsilon'_k - \varepsilon_F)^2. \quad (11.20)$$

В рассмотренных выше примерах приближения Хартри и Хартри-Фока $k_1 = k_3$ и область интегрирования в (11.18) обращается в нуль. По этой причине время жизни квазичастиц оказывается бесконечным.

11.5 Топология диаграмм.

До сих пор мы рисовали примеры диаграмм базируясь на простых физических соображениях. Теперь нам нужно научиться систематическому способу построения всех диаграмм произвольного порядка. Снова мы стартуем с системы невзаимодействующих фермионов, помещенной во внешнее поле, так, как это было в пп. 10.1-10.4. Мы рассматривали диаграммы, упорядоченные во времени (время возрастало справа-налево). Такие диаграммы называются голдстоуновскими. Систематический способ построения таких диаграмм в n порядке состоит в том, что на горизонтальной оси ставится n жирных

точек, отвечающих временам t'_1, \dots, t'_n , а по краям две внешние нежирные точки, соответствующие временам t_1 и t_2 . Осталось соединить точки непересекающимися линиями так, чтобы в каждую точку входила и из каждой точки выходила всего одна линия. Перебрав все возможные варианты соединения, мы и получим все голдстоуновские диаграммы (см., например, рис 30.). Для удобства при этом можно часть точек смещать вверх или вниз, важно только, чтобы порядок расположения точек во времени не изменялся. Использование определения (11.3) для функции Грина, включающего в себя обе функции G^+ и G^- позволяет интегрировать по времени в каждом сомножителе от $-\infty(1-i\eta)$ до $\infty(1-i\eta)$ и строить феймановские диаграммы. При этом для $l > k_F$ автоматически получаем G^+ , а в противоположном случае $-G^-$. Временной порядок точек не имеет значения и рис.30 может быть представлен в виде рис.40.

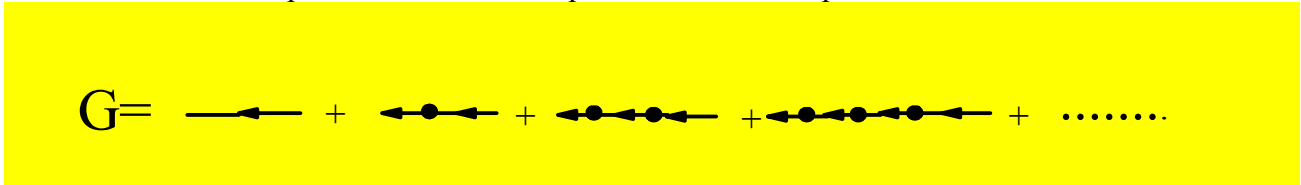


Рис.40.

Для фурье-образов рис.40 может быть переписан в виде уравнения:

$$G(k_2, k_1) = \delta_{k_2, k_1} G_0(k_1) + G_0(k_1) V_{k_2, k_1} G_0(k_2) + \sum_{\text{по всем } q} G_0(k_1) V_{q, k_1} G_0(q) V_{k_2, q} G_0(k_2) + \dots \quad (11.21)$$

Теперь попробуем построить голдстоуновские и феймановские диаграммы в случае отсутствия внешнего поля, но для взаимодействующего газа. С этой целью нарисуем n извилистых линий и две внешние, тонкие точки так, как это показано на рис.41. После

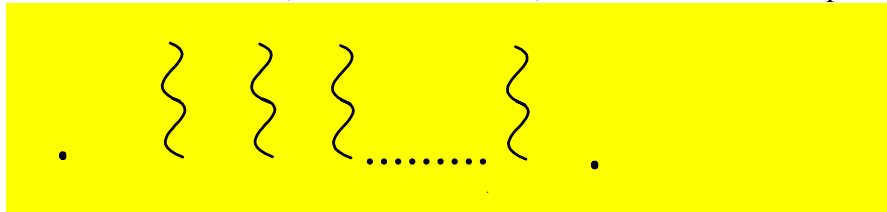


Рис. 41

чего соединим вершины извилистых линий и точки направленными стрелками так, что из правой точки выходит, а в левую входит одна линия. В каждую вершину входит одна линия и из вершины выходит линия. Соединения произведем всеми возможными в смысле Голдстоуна, топологически различными способами. Часть диаграмм, соответствующих поправке второго порядка к функции Грина, изображена на рис.42.

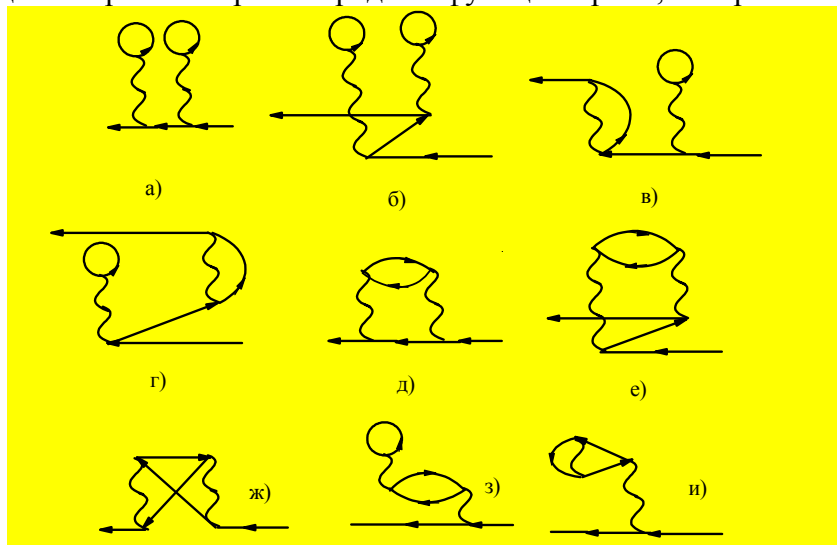


Рис.42.

Некоторые из полученных диаграмм являются лишними. Из диаграмм рис.42 при нулевой температуре следует отбросить б), г), е), з), и), поскольку они содержат в один момент

времени частицу и дырку с одинаковыми импульсами. В результате, выживают только фейнмановские (без упорядочения во времени) диаграммы, показанные на рис. 43.

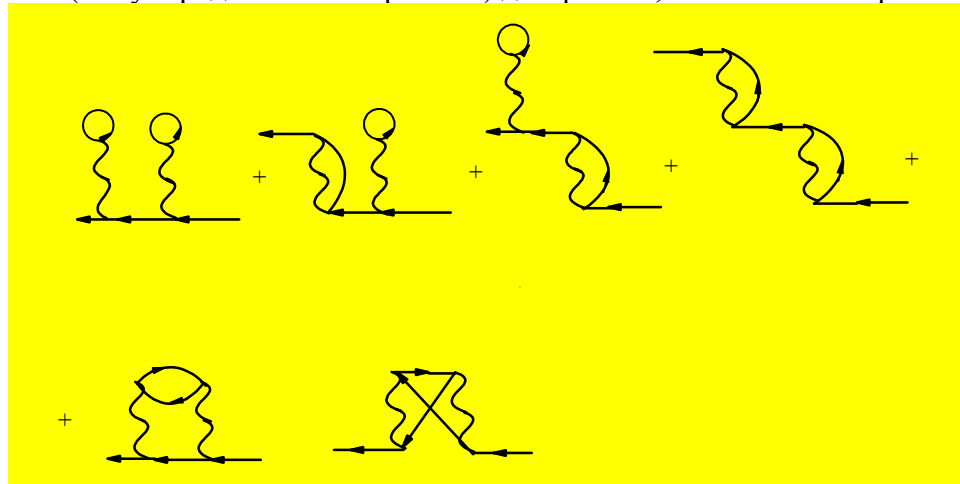


Рис.43.

Эти же диаграммы часто представляют как на рис.44, делая топологически эквивалентное (в смысле Фейнмана) преобразование.

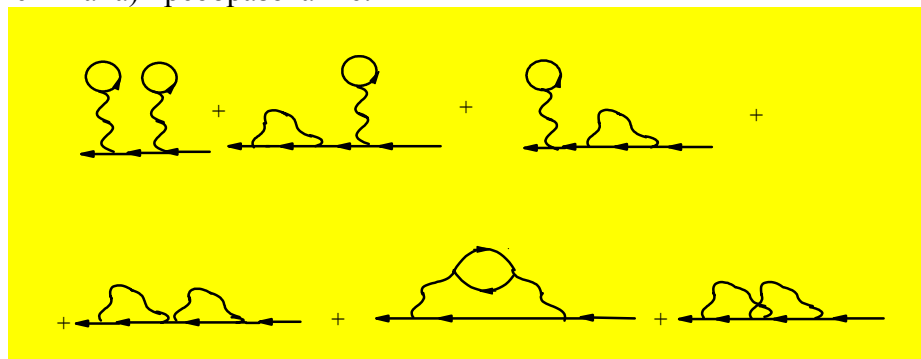


Рис.44.

В качестве примера выпишем вначале аналитическое выражение, соответствующее фурье трансформанте предпоследней диаграммы на рис. 44 (см. рис. 36):

$$(-1)[iG_0(\mathbf{k},\omega)]^2 \sum_{l,q} \int d\varepsilon/2\pi d\beta/2\pi [iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega-\varepsilon)] [iG_0(\mathbf{l},\beta)] [iG_0(\mathbf{l}+\mathbf{q},\beta+\varepsilon)] [-iV_q]^2. \quad (11.22)$$

Заметим, что выражение (11.22) дает сумму двух диаграмм рис.42 д)+е). Энергетические параметры в вершинах сохраняются также, как и импульсы. Здесь принято следующее соглашение для нераспространяющихся линий:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon/2\pi [iG_0(\mathbf{k},\varepsilon)] = -1 ; k < k_F \\ = 0 ; k > k_F \quad (11.23)$$

Теперь запишем аналитическое выражение для той же диаграммы в (k,t) пространстве (рис. 45).

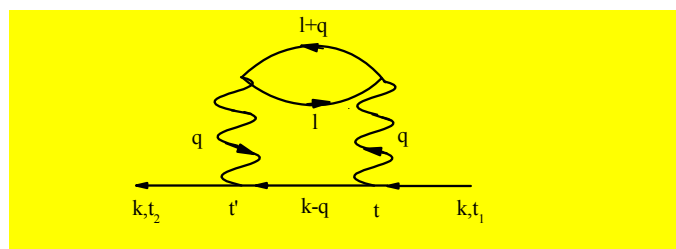


Рис. 45.

$$(-1) \sum_k \int_{-\infty(1-i\eta)}^{\infty(1-i\eta)} dt dt' [iG_0(\mathbf{k},t-t')] [-iV_q] [iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},t'-t)] [iG_0(\mathbf{l},t-t')] [iG_0(\mathbf{l}+\mathbf{q},t'-t)] [iG_0(\mathbf{k},t_2-t')]. \quad (11.24)$$

Развитые представления хороши всем, за исключением одного обстоятельства: следуя им можно для приближенной функции Грина получить выражения, дающие неправильное число частиц в системе. Этой трудности можно избежать, перейдя к рассмотрению системы типа большого канонического ансамбля с фиксированным (но неизвестным) уровнем химического потенциала. В конце вычислений тогда можно найти величину химического потенциала из условия $N=N_0$, где N_0 –реальное число частиц в системе.

Прежде чем переходить к более детальному описанию этого метода, найдем связь между функцией Грина и числом частиц в системе.

$$N = 2 \langle \Psi_0 | \sum_k c_k^+ c_k | \Psi_0 \rangle. \quad (11.25)$$

Множитель 2 в (11.25) связан с вырождением по спину. Выражение под знаком суммы записывается с помощью (11.4), если положить $t_1=0$, $t_2=t$, $k_2=k_1=k$, $t \rightarrow 0^+$:

$$N = 2 \sum_k (-i) \lim_{t \rightarrow 0^+} G(k, t) = -2i \lim_{t \rightarrow 0^+} \int d^3k / (2\pi)^3 \int d\omega / 2\pi G(k, \omega) \exp(-i\omega t). \quad (11.26)$$

Отметим специально, что выражение (11.26) задает число частиц и его справедливость никак не связана с видом функции Грина, в частности, совершенно не важно, возможно ли введение квазичастиц в системе.

Функция Грина, входящая в (11.26), сама выражается через свободную функцию Грина, которая зависит от фермиевского импульса, а следовательно, от N_0 . Таким образом, выражение (11.26) устанавливает связь между N и N_0 , которая не сводится к условию $N=N_0$.

Один из способов решения этой проблемы состоит, как указано выше, в изменении гамильтониана. Новый гамильтониан имеет вид:

$$H' = H - \mu N = H_0' + H_I,$$

где

$$H_0' = \sum_k (\epsilon_k - \mu),$$

$$H_I = 1/2 \sum_{klmn} c_k^+ c_l^+ c_m c_n. \quad (11.27)$$

Основное состояние гамильтониана H_0' находится из условия минимума энергии. Минимум реализуется, если все состояния вплоть до уровня химического потенциала заполнены, а выше –пусты, т.е. $k_F^\mu = (2m\mu)^{1/2}$. Одночастичная свободная функция Грина, соответствующая этому гамильтониану, равна

$$G_0(k, \omega) = \{ \omega - (\epsilon_k - \mu) + i\delta_k^\mu \}^{-1}. \quad (11.28)$$

$$\delta_k^\mu = 1 \text{ для } \epsilon_k > \mu,$$

$$= -1 \text{ для } \epsilon_k < \mu.$$

Правила построения и вычисления диаграмм остаются прежними. Зато теперь, приравняв вычисленное с помощью приближенной функции Грина число электронов N , числу электронов в системе N_0 , можно гарантировать, что функция Грина будет соответствовать правильному числу частиц.

Вблизи полюса одночастичная функция Грина ферми-жидкости может быть представлена в виде, подобном (11.28):

$$G(\mathbf{p}, \omega) = Z \{ \omega - v_F(\mathbf{p} - \mathbf{p}_F) + i0^* \text{sign}(\omega) \}^{-1} + g(\mathbf{p}, \omega), \quad (11.29)$$

где $v_F = p_F/m^*$, а $g(\mathbf{p}, \omega)$ – гладкая функция. Теперь, следуя [10], мы можем доказать, что распределение частиц, изображенное на рис.8, действительно реализуется в ферми-жидкости. С этой целью вычислим разность числа частиц по обе стороны от ферми-сферы

$$N(\mathbf{p}_F + \mathbf{q}) - N(\mathbf{p}_F - \mathbf{q}), \quad \mathbf{q} \rightarrow +0.$$

Вблизи полюса вместо $\text{sign}(\omega)$ можно записать $\text{sign}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_F)$ и опустить в (11.26) множитель $\exp(-i\omega t)$, имея в виду, что $t \rightarrow -0$:

$$N(p_F+q)-N(p_F-q) = -2i \int_{-\infty}^{\infty} Z[(\omega+v_F q-i0)^{-1} - (\omega-v_F q+i0)^{-1}] d\omega/2\pi. \quad (11.30)$$

Замкнув контур интегрирования полуокружностью на верхней или нижней полуплоскости, мы получим $N(p_F+q)-N(p_F-q)=2Z$. Поскольку $0 \leq N(p) \leq 2$ (мы учитывали двукратное вырождение по спину), то $0 \leq Z \leq 1$, а распределение частиц по импульсам имеет скачок на ферми поверхности, равный $Z=1$ при отсутствии взаимодействия.

Задача: Построить фейнмановскую диаграмму, топологически эквивалентную голдстоуновской, изображенной на рис.46.

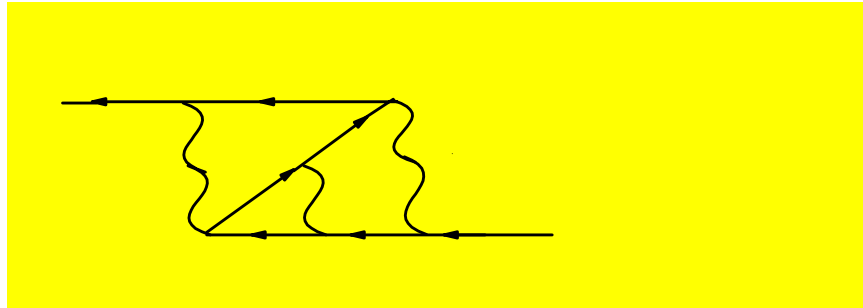


Рис.46.

XII. Уравнение Дайсона.

*Есть люди: мысли их и жесты
До оскорбительности ясны.
К. Бальмонт.*

12.1 Вывод уравнения Дайсона.

Назовем собственно энергетической частью любую диаграмму, которую можно вставить в линию частицы или дырки. Примеры таких собственно энергетических частей приведены на рис.47.

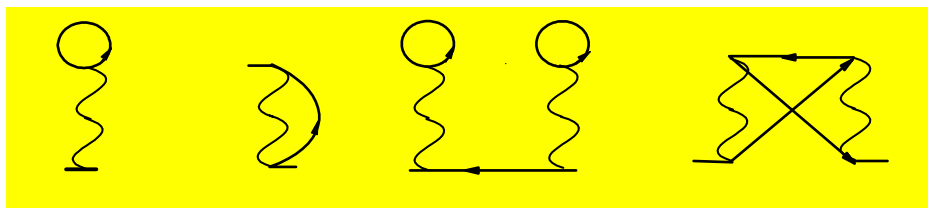


Рис. 47.

Неприводимой собственно энергетической частью назовем такую собственно энергетическую часть, которую нельзя разбить на две путем удаления линии одной частицы или дырки.

Так на рис.47 неприводимыми являются диаграммы 1,2 и 4. Обратим внимание на то, что частичная сумма в п.11.3 содержала только две первые неприводимые собственно энергетические части из рис. 47. Аналогично, мы можем суммировать с учетом трех неприводимых частей (см. рис.48).

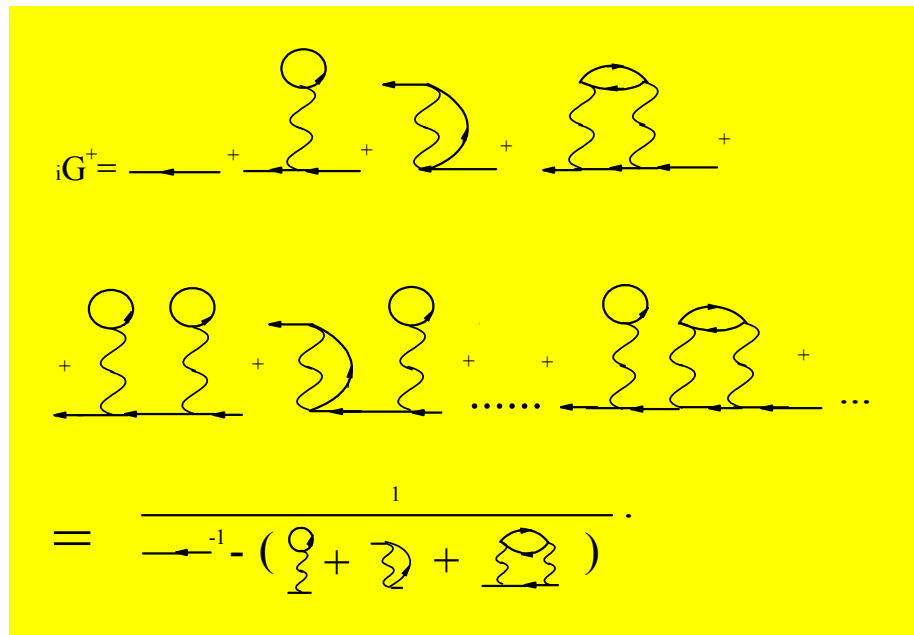


Рис. 48.

В самом общем случае нужно просуммировать по всем повторениям всех неприводимых собственно энергетических частей. Кратко результат суммирования может быть изображен так, как это показано на рис.49.

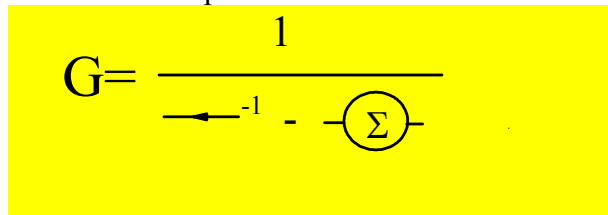


Рис.49.

Здесь кружком со знаком суммы внутри обозначена сумма всех неприводимых собственно энергетических частей (*собственно энергетическая функция* или *массовый оператор*, см. рис.50.)

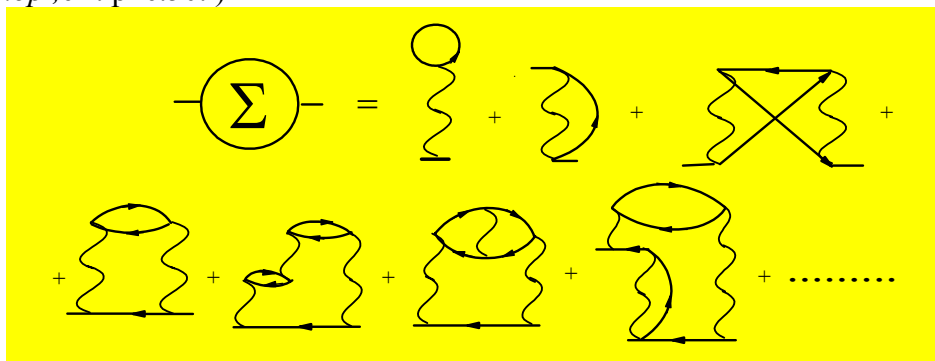


Рис. 50.

Рисунок 49 легко перевести на язык формул:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = [\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega) + i\delta_{\mathbf{k}}]^{-1}. \quad (12.1)$$

$$-\textcircled{\Sigma} = -i\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$$

Равенство (12.1) или диаграмма рис. 49 называются уравнением Дайсона. Легко догадаться, что приведенный нами путь рассуждений справедлив только в случае отсутствия внешних полей. В общем случае уравнение Дайсона имеет несколько иной вид (сводящийся, естественно, к (12.1) при отсутствии внешних полей), получаемый путем следующего рассуждения.

Рассмотрим произвольную диаграмму высокого порядка для функции Грина. Она начинается с линии G_0 . Далее следует одна из неприводимых собственно энергетических частей. Если отсечь эти два элемента, то остаток опять начнется с линии G_0 и может содержать произвольное количество неприводимых собственно энергетических частей. Другими словами, сумма остатков опять будет функцией Грина. Следовательно:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) + G_0(\mathbf{k}, \omega) \Sigma(\mathbf{k}, \omega) G(\mathbf{k}, \omega). \quad (12.2)$$

На диаграммном языке это уравнение представляется так, как это показано на рис.51. Двойной линией со стрелкой на диаграмме обозначена полная функция Грина.

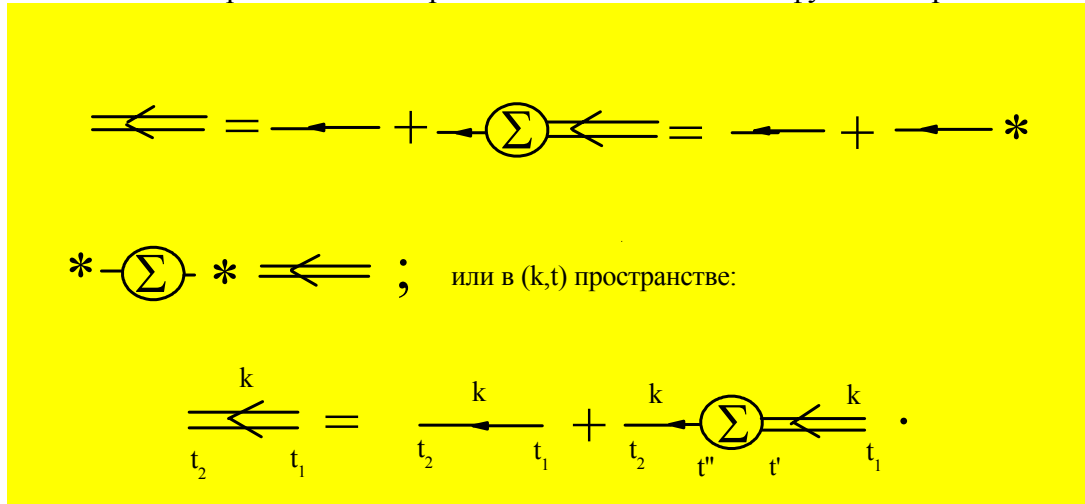


Рис. 51.

Следует отметить, что первая и последняя диаграммы на рис. 51 имеют более общий смысл, чем стоящая после знака равенства. Последняя диаграмма на рис. 51, например, соответствует уравнению не представимому в виде сомножителей:

$$iG(\mathbf{k}, t_2 - t_1) = iG_0(\mathbf{k}, t_2 - t_1) + \iint dt' dt'' iG_0(\mathbf{k}, t_2 - t'') (-i) \Sigma(\mathbf{k}, t'' - t') iG(\mathbf{k}, t' - t_1). \quad (12.3)$$

Не следует обольщаться, уравнение Дайсона не решает задачи поиска функции Грина. В нем сделано суммирование по повторениям неприводимой собственно энергетической части, но сама сумма неприводимых собственно энергетических частей осталась неизвестной. Ее еще предстоит искать (вообще говоря, приближенными способами). Например, в нижнем порядке в сумме можно оставить пузырь и открытую устрицу. Из уравнения Дайсона (12.1) мгновенно получится результат приближения Хартри-Фока. Можно сказать, что $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ соответствует некоторому эффективному потенциалу, который действует на частицу со стороны всех остальных частиц системы.

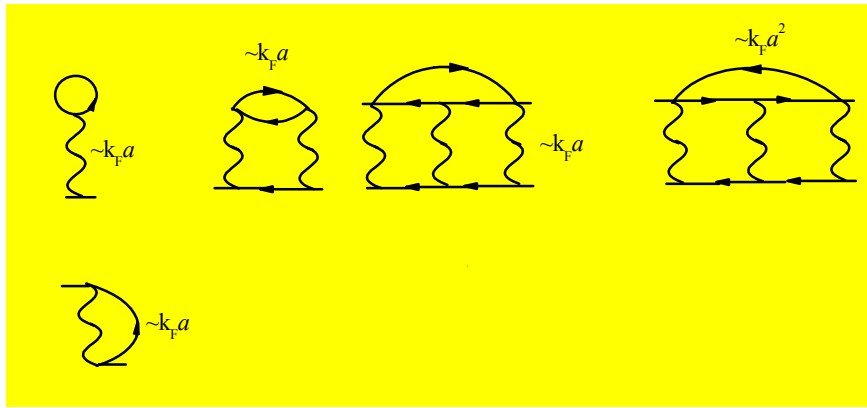
Уравнение Дайсона может быть переписано в виде

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega).$$

Следовательно, оно задает связь между суммами всех приводимых и всех неприводимых диаграмм. Подобная запись позволяет также прояснить роль собственно энергетической функции: если в окрестности полюса одночастичной функции Грина возможно введение квазичастиц, то действительная часть $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ ответственна за перенормировку массы, а мнимая часть за конечное время жизни квазичастиц.

12.2 Лестничное приближение.

Вернемся теперь к рассмотрению ферми-системы низкой плотности с короткодействующим потенциалом [8], ранее упоминавшейся нами в п.2.11. Обозначим радиус сил отталкивания через a , а среднее расстояние между частицами через r_0 . Мы предполагаем, что $a/r_0 \ll 1$. Галицким показано, что каждой дырочной линии на диаграмме соответствует множитель $k_F a \ll 1$. Поэтому:



и при вычислении собственно энергетической функции следует оставить только диаграммы, содержащие одну дырочную линию (рис. 52).

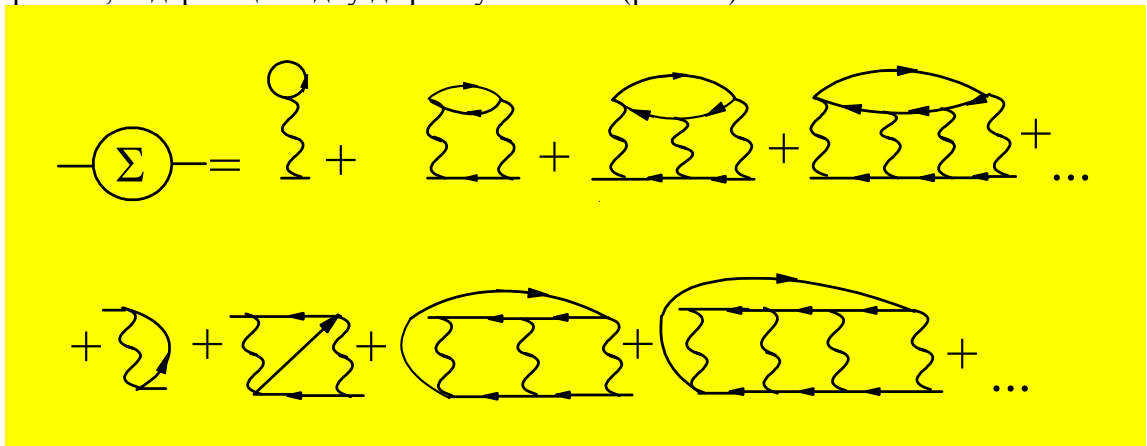


Рис.52.

Такие диаграммы называют лестничными. Их сумму находят с использованием так называемой К-матрицы. Ее определение дано на рис.53. Не сложно догадаться, что для К-

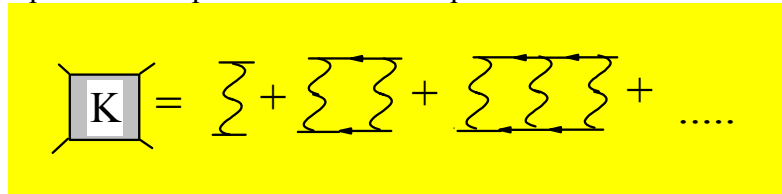


Рис.53.

матрицы справедливо рассуждение, аналогичное тому, которое привело нас к выражению (12.2). Графически соответствующее уравнение (аналогичное уравнению Дайсона) показано на рис.54.

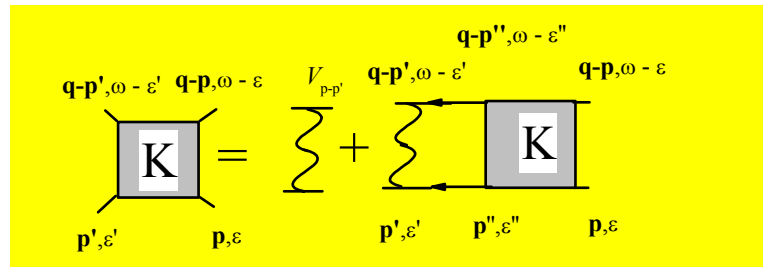


Рис.54.

Его функциональная форма имеет вид:

$$K(\mathbf{p}', \varepsilon', \mathbf{p}, \varepsilon, \mathbf{q}, \omega) = V_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} + i \int d^3 \mathbf{p}'' d\varepsilon'' / (2\pi)^4 V_{\mathbf{p}''-\mathbf{p}} G_0(\mathbf{p}'', \varepsilon'') G_0(\mathbf{q}-\mathbf{p}'', \omega-\varepsilon'') K(\mathbf{p}'', \varepsilon'', \mathbf{p}, \varepsilon, \mathbf{q}, \omega). \quad (12.4)$$

Это уравнение может быть решено, например, итерациями. После подстановки решения в диаграммный ряд рис.52 получим величину собственно энергетической функции (рис.55.).

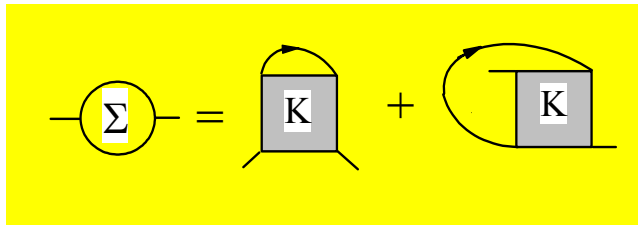


Рис. 55.

Осталось подставить найденную собственно-энергетическую функцию в уравнение Дайсона и найти функцию Грина. Вычисления Галицкого привели к следующему ответу для массы и времени жизни квазичастиц в трехмерном случае:

$$m^* = m[1 + 8/(15\pi^2)(7\ln 2 - 1)k_F^2 a^2]; \tau_k^{-1} = \pi^{-1} k_F^2 a^2 (k - k_F)^2. \quad (12.5)$$

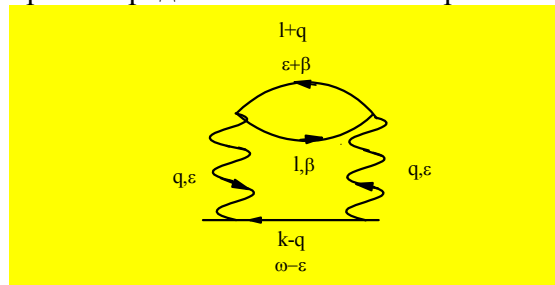
12.3 Квазичастицы в приближении хаотических фаз.

Напомним еще раз, что гамильтониан взаимодействия для электронного газа с учетом компенсирующего распределенного заряда имеет следующую форму:

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + 1/2 \sum_{q,m,n} V_q c_{n-q}^\dagger c_{m+q}^\dagger c_m c_n. \quad q \neq 0 \quad (12.6)$$

Член, соответствующий нулевой передаче импульса выпал, благодаря наличию компенсирующего заряда.

Типичный член второго порядка в собственно энергетической функции имеет вид:



А его аналитическое выражение для трехмерного электронного газа расходится при $q \rightarrow 0$:

$$(-1) \sum_{q,l} \int d\epsilon d\beta / (2\pi^2) iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\epsilon) iG_0(\mathbf{q}+\mathbf{l}, \beta+\epsilon) iG_0(\mathbf{l}, \beta) (4\pi e^2)^2 / \Omega^2 q^4. \quad (12.7)$$

Заменив суммирование по q интегрированием, мы мгновенно обнаруживаем, что интеграл расходится как q^{-1} . Такова же ситуация и в более высоких порядках, где большинство диаграмм расходится. Причем главным членом в каждом порядке оказывается тот, в котором каждой линии взаимодействия соответствует импульс q . (Каждая из таких линий вносит в интеграл вклад, пропорциональный q^{-2} .) Учет только процессов передачи импульса q соответствовал приближению хаотических фаз (см. п.7.3). На диаграммном языке это означает учет при вычислении собственно энергетической функции только так называемых кольцевых диаграмм (рис. 56.).

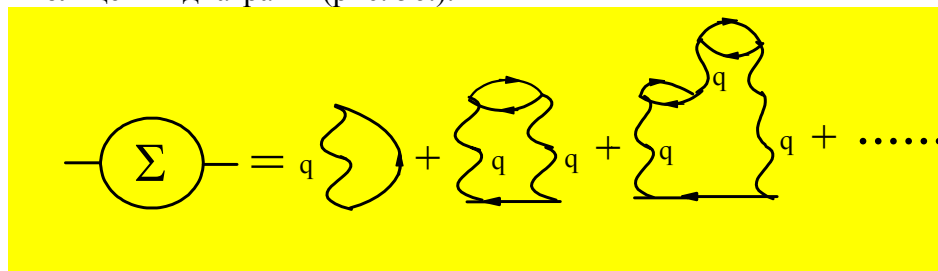


Рис. 56.

Первый из членов суммы рис.56 конечен, остальные обладают расходимостью. Суммирование диаграмм рис.56 производится следующим образом. В каждой из них выделяется множитель, соответствующий свободной частице и выносится за скобку, а

второй сомножитель суммируется как геометрическая прогрессия. Первый шаг изображен на рис. 57.

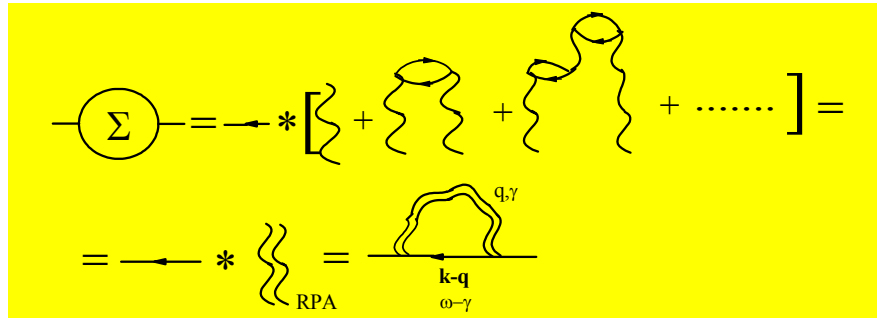


Рис.57.

Здесь двойная волнистая линия отвечает экранированному взаимодействию между частицами (сравните с п.6.6). Матричный элемент эффективного потенциала легко вычисляется:

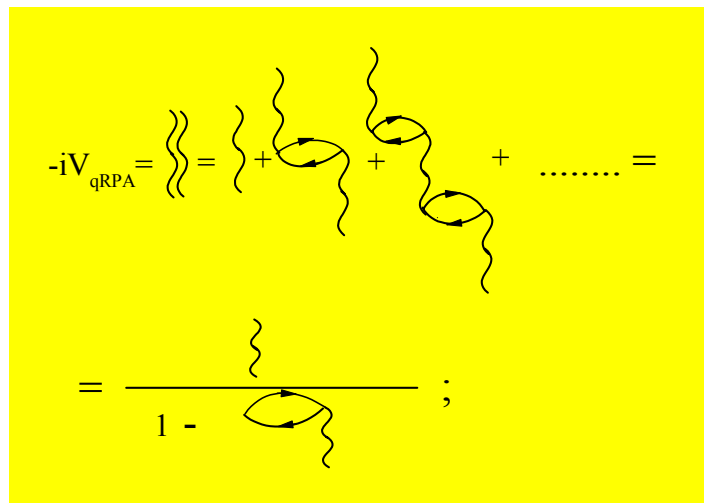


Рис. 58.

В переводе на язык функций, результат рис.58 записывается как:

$$V_{\text{qRPA}}(\mathbf{q}, \omega) = V_{\mathbf{q}} (1 + V_{\mathbf{q}} \pi_0(\mathbf{q}, \omega))^{-1} = V_{\mathbf{q}} / \epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega). \quad (12.8)$$

$$-i\pi_0(\mathbf{q}, \omega) = 2 * (-1) \int d^3 \mathbf{k} d\epsilon / (2\pi)^4 i \{ \omega + \epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \}^{-1} i \{ \epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}} + i\delta_{\mathbf{k}} \}^{-1}. \quad (12.9)$$

Множитель 2 в (12.9) отражает спиновое вырождение, множитель (-1) соответствует наличию одной фермионной петли в знаменателе рис.58. Диаграммы, изображенные на рис. 58 называют поляризационными. Они изображают рождение виртуальных электронно-дырочных пар всеми возможными способами. Потенциал голого электрона поляризует среду, а облако поляризационных частиц экранирует потенциал, ослабляя взаимодействие между электронами. Иногда говорят о том, что электрон окружен корреляционной дыркой.

Сравнение выражения (12.8) с формулой (7.20) показывает, что $\pi_0(\mathbf{q}, \omega) = -\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$, где $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ – функция реакции плотность- плотность невзаимодействующего электронного газа. Следовательно, для практических нужд мы можем пользоваться результатами главы IX. В частности, в «статическом» приближении $\omega=0$ и малых импульсах, аналогично (9.10) имеем

$$V_{\text{qRPA}} = 4\pi e^2 (q^2 + q_{\text{TF}}^2)^{-1}. \quad (12.10)$$

Теперь мы можем перейти к тому, что раньше было сделать не просто – к исследованию собственно-энергетической функции и спектра квазичастиц в приближении хаотических фаз. С этой целью нам необходимо перевести на язык формул диаграммы рис. 57. Мы не будем заниматься громоздкими вычислениями, а только наметим путь и приведем результат. Согласно рисунку,

$$\begin{aligned}
-i\Sigma_{\text{RPA}}(\mathbf{k},\omega) &= \sum_{\mathbf{q}} \int d\gamma/(2\pi) [(-i)V_{\text{RPA}}(\mathbf{q},\omega)] [iG_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega-\gamma)] = \\
&= \int d^3\mathbf{q}/(2\pi)^3 \int d\gamma/(2\pi q^2) * 4\pi e^2 \varepsilon^{-1}_{\text{RPA}}(\mathbf{q},\gamma) \{\omega-\gamma-\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}+i\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}\}^{-1}.
\end{aligned} \tag{12.11}$$

После подстановки результата вычислений выражения (12.11) в уравнение Дайсона функция Грина оказывается имеющей квазичастичную форму с энергией квазичастиц вблизи поверхности Ферми:

$$\begin{aligned}
\varepsilon'_{\mathbf{k}} &= k k_F/m - 0.166 r_s (\ln r_s + 0.233) k k_F/2 + const, \\
\tau^{-1} &= 0.252 r_s^{1/2} (k - k_F)^2/2m.
\end{aligned} \tag{12.12}$$

Сравнив верхнюю и нижнюю строчки в выражениях (12.12) легко убедиться в том, что критерий существования квазичастиц, сформулированный в п.11.4 действительно выполняется. В случае больших q_{TF} и статическом пределе по экранированию, эффективная масса квазичастиц трехмерной электронной системы имеет вид

$$m^* = m (1 + 16/3 m \pi e^2 k_F^3 q_{\text{TF}}^{-5}). \tag{12.13}$$

Задача: Пользуясь соотношением (12.12) найти эффективную массу квазичастиц в приближении хаотических фаз.

12.4 Поляризационная функция в общем случае.

Развитые выше представления об эффективном перенормированном взаимодействии могут быть обобщены путем учета на рис.58 не только электрон-дырочных петель, но вообще всех поляризационных диаграмм, как это показано на рис.58а:

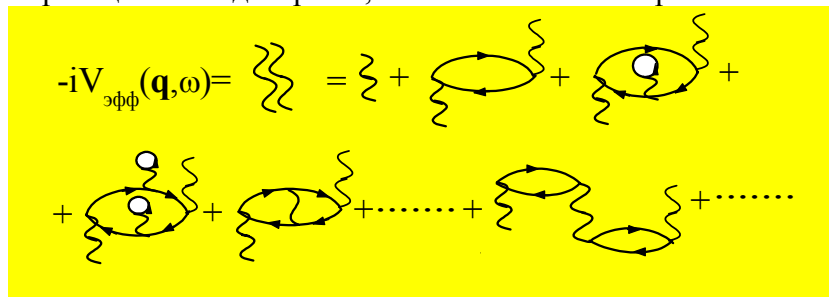


Рис.58а.

Назовем поляризационной частью взаимодействия любую диаграмму без внешних линий, которую можно вставить в линию взаимодействия. Неприводимой поляризационной частью назовем такую поляризационную часть взаимодействия, которую нельзя разбить на две несвязанные части путем удаления одной линии взаимодействия. Поляризационную функцию определим как мнимую единицу, умноженную на сумму всех неприводимых поляризационных частей. Пример поляризационных частей показан на рис. 59. Диаграммы 1,3,4,5,6 являются неприводимыми. Диаграмма 2 –приводимая.

Не прозевайте: Пузырь не является поляризационной частью.

Введя поляризационную функцию, согласно рис.60, получим для нее уравнение, аналогичное уравнению Дайсона (две нижние строчки на рис.60), в аналитической форме имеющее вид:

$$V_{\text{эфф}}(\mathbf{q},\omega) = V_q/\varepsilon(\mathbf{q},\omega) = V_q \{1 + V_q \pi(\mathbf{q},\omega)\}^{-1}. \tag{12.14}$$

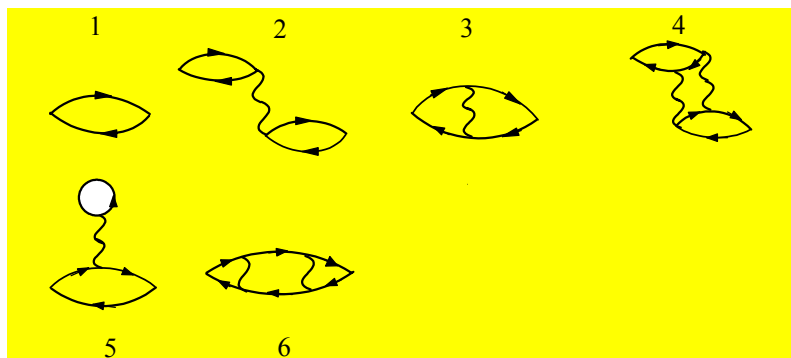


Рис.59.

$$-i\pi(\mathbf{q}, \varepsilon) = \text{loop with } \pi = \text{loop} + \text{loop with wavy line} + \text{loop with wavy line and vertex} + \text{loop with wavy line and vertex} + \dots$$

$$\text{wavy line} = \text{wavy line} + \text{wavy line with loop and } \pi;$$

$$\text{wavy line} = \frac{\text{wavy line}}{1 - \text{loop with } \pi}.$$

Рис.60.

С помощью эффективного потенциала рис.60 разложение для собственной-энергетической функции сильно упрощается:

$$-\Sigma = \text{vertex} + \text{loop with wavy line} + \text{loop with wavy line and vertex} + \dots$$

Рис. 61.

Мы пришли к ряду, в котором нет ни одной линии взаимодействия, явно содержащей поляризационные части.

Задача: Какие из диаграмм, приведенных на рис.62, являются неприводимыми поляризационными?

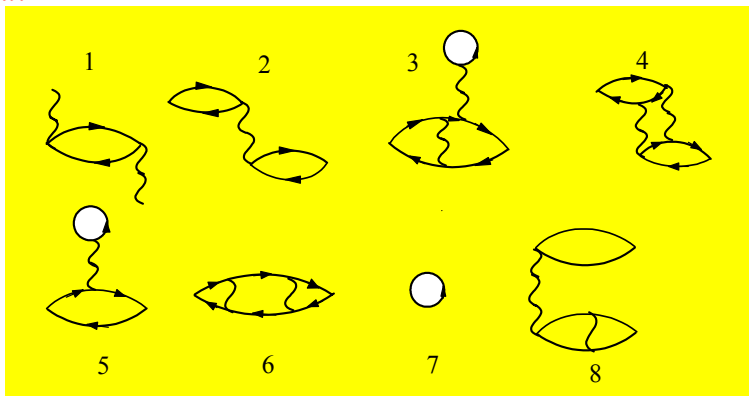


Рис. 62.

ХIII. Обоснование ферми-жидкостных представлений.

*Я не печалюсь, что с природы
Покров ее скрывающий снят...
Н. Гумилев.*

13.1 Самосогласованная теория возмущений.

Прежде всего произведем еще одно частичное суммирование. В диаграммный ряд для собственно-энергетической функции входят многочисленные последовательности типа изображенной на рис. 63.

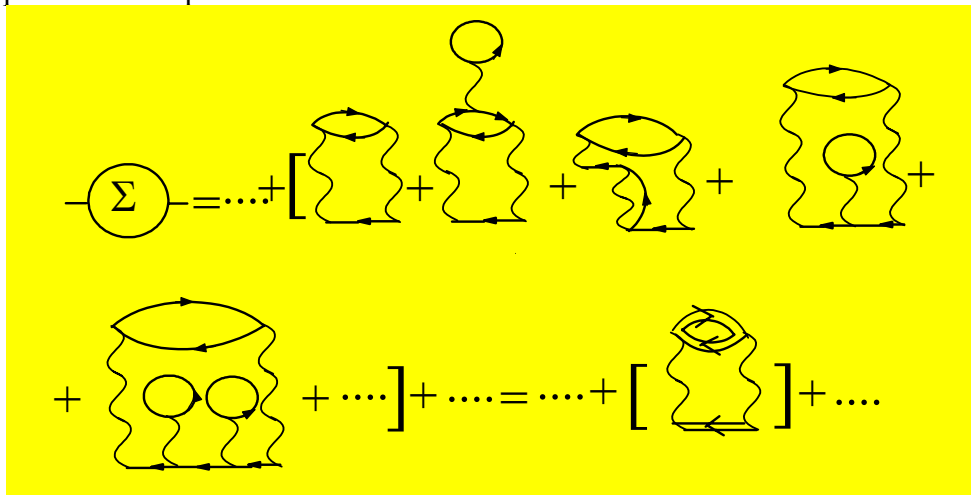


Рис. 63.

В этих последовательностях каждая из линий частиц содержит все больше собственно-энергетических вставок, поэтому в квадратных скобках возможен переход, показанный в нижней строчке рис.63. Здесь, как всегда, двойной линией обозначена точная функция Грина системы. Первая диаграмма ряда в квадратных скобках называется скелетной, а проделанная нами процедура- одеванием скелетов. Одевание следует провести у каждой скелетной диаграммы (здесь важно не учесть одни и те же диаграммы дважды!) и тогда мы получим выражение для собственно-энергетической функции, в виде ряда, изображенного на рис. 64.

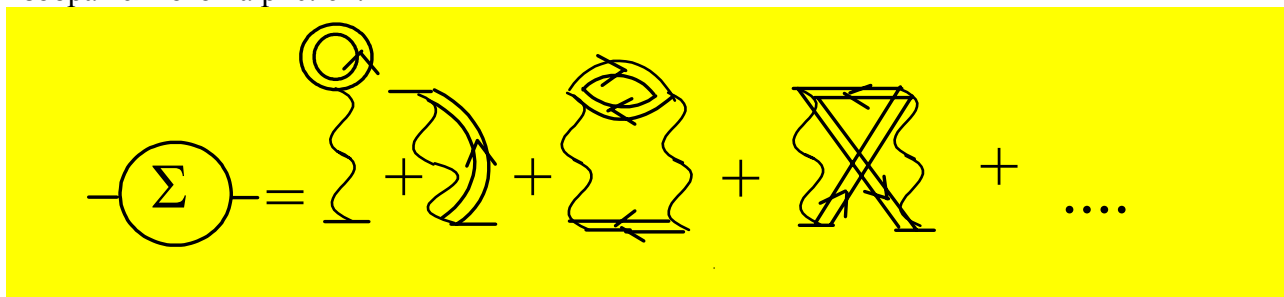


Рис.64.

Точные функции Грина, необходимые для вычисления собственно-энергетической функции по рис.64, сами неизвестны. Они должны быть найдены из уравнения Дайсона, поэтому уравнения рис.64 и рис.51 следует решать самосогласовано: сначала найти собственно-энергетическую функцию с голыми линиями, подставить ответ в уравнение Дайсона и определить функцию Грина, ее вставить в уравнение рис. 64, а с результатом его решения вновь из уравнения Дайсона найти функцию Грина и т.д. Процедуру в оптимальном случае следует продолжать до тех пор, пока результат не перестанет изменяться. Этот результат и будет результатом самосогласованной теории возмущений.

Можно одновременно перенормировать как функцию Грина, так и потенциал взаимодействия. Собственно-энергетическая функция тогда приобретет вид:

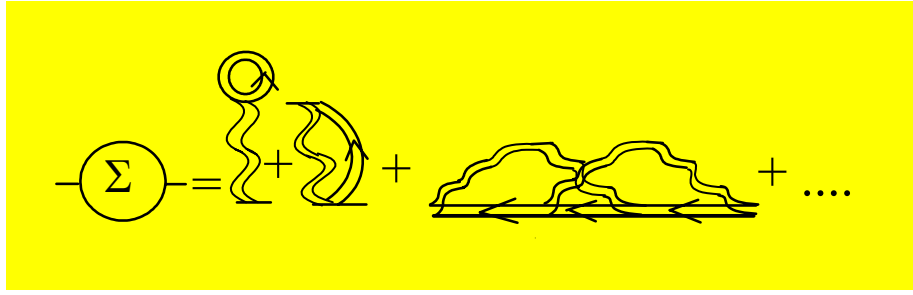


Рис.65.

Задача: Получить самосогласованное уравнение на функцию Грина в приближении Хартри-Фока (приближение Хартри-Фока с учетом запаздывания).

13.2 Обоснование существования квазичастиц.

Целью настоящего параграфа является обоснование того факта, что во всякой ферми-системе, где применима теория возмущений, зависящих от времени, и возможно разложение функции Грина в диаграммный ряд, можно ввести квазичастицы. Согласно рис. 49, самосогласованное уравнение для функции Грина имеет вид:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) - i \Sigma_{\mathbf{I}}(\mathbf{k}, \omega)\}^{-1}. \quad (13.1)$$

В соответствии с концепцией квазичастиц, мы можем предположить, что мнимая часть самосогласованной функции Грина может быть представлена в виде:

$$\lim_{\omega \rightarrow \mu} \Sigma_{\mathbf{I}}(\mathbf{k}, \omega) = \text{sign}(\mu - \omega) C_{\mathbf{k}} (\omega - \mu)^2, \quad (13.2)$$

где $C_{\mathbf{k}} \geq 0$ действительное число. Функция Грина (13.1) переписывается в виде:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) - i \text{sign}(\mu - \omega) C_{\mathbf{k}} (\omega - \mu)^2\}^{-1}. \quad (13.3)$$

Выражение (13.3) и представляет собой самосогласованное решение для функции Грина [9]. Оказывается, что предел любого одетого скелета при $\omega \rightarrow \mu$ пропорционален $(\omega - \mu)^{2m}$, где $m=1, 2, 3, \dots$, а значит, мнимая часть собственно энергетической функции действительно удовлетворяет условию (13.2).

Теперь найдем энергии одночастичных состояний $E_{\mathbf{k}}$ и покажем, что условие, сформулированное в п.11.4 выполняется. Полюсы функции Грина (13.3) определяются условием

$$\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) - i \text{sign}(\mu - \omega) C_{\mathbf{k}} (\omega - \mu)^2 = 0. \quad (13.4)$$

Одно из решений этого уравнения имеет вид

$$\omega = \mu, \quad \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (13.5)$$

Последнее условие определяет величину k_0 в k пространстве, отвечающую энергии μ . В окрестности химического потенциала членом, содержащим $(\omega - \mu)^2$, можно пренебречь, а $\Sigma_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega)$ разложить в ряд. Тогда для энергии одночастичных возбуждений получим:

$$E_{\mathbf{k}} = \mu + \{(k - k_0)[(\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}})_{k_0} + (\nabla_{\mathbf{k}} \Sigma_{\mathbf{R}})_{k_0, \mu}]\} \{1 - (\partial \Sigma_{\mathbf{R}} / \partial \omega)_{k_0, \mu}\}^{-1} \quad (13.6)$$

Следующий шаг состоит в вычислении мнимой части энергии, определяющую обратное время жизни. Разложим $\Sigma_{\mathbf{R}}$ и $\Sigma_{\mathbf{I}}$ вблизи $E_{\mathbf{k}}$. Разложение мнимой части начинается с члена второго порядка малости:

$$\Sigma_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma_{\mathbf{R}}(\mathbf{k}, E_{\mathbf{k}}) + (\partial \Sigma_{\mathbf{R}} / \partial \omega)_{E_{\mathbf{k}}} (\omega - E_{\mathbf{k}}) + \dots \quad (13.7)$$

$$\Sigma_{\mathbf{I}}(\mathbf{k}, \omega) = \text{sign}(\mu - E_{\mathbf{k}}) C_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \dots \quad (13.8)$$

Вместо (13.4) мы получим:

$$\omega = E_{\mathbf{k}} + \{1 - (\partial \Sigma_{\mathbf{R}} / \partial \omega)_{E_{\mathbf{k}}}\}^{-1} \{i \text{sign}(\mu - E_{\mathbf{k}}) C_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}} - \mu)^2\} \quad (13.9)$$

Следовательно функция Грина действительно имеет квазичастичный вид с энергией и временем жизни квазичастиц

$$\varepsilon'_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}, \quad \tau^{-1}_{\mathbf{k}} = + \{1 - (\partial \Sigma_{\mathbf{R}} / \partial \omega)_{E_{\mathbf{k}}}\}^{-1} \{\text{sign}(\mu - E_{\mathbf{k}}) C_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}} - \mu)^2\}. \quad (13.10)$$

Теперь есть смысл еще раз обсудить вопрос о распределении частиц и квазичастиц (см. также п.11.5), рассматривавшийся в п.2.11. Казалось бы, что включение взаимодействия будет просто размывать ферми-ступеньку. Тем не менее, в экспериментах на металлах всегда обнаруживается не смазанная ферми-ступенька. Эта проблема была исследована в работе [10]. В соответствии с (11.25), заполнение частицами состояния \mathbf{k} выражается формулой (спиновое вырождение не учитываем):

$$N_{\mathbf{k}} = -i \lim_{t \rightarrow 0} G(\mathbf{k}, t). \quad (13.11)$$

т.е. функцией Грина в момент времени, непосредственно предшествующий $t=0$. Из соотношений (13.10) ясно, что функция Грина имеет вид:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = Z_{\mathbf{k}} (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - i/\tau_{\mathbf{k}})^{-1} + f(\mathbf{k}, \omega), \\ Z_{\mathbf{k}} = \{1 - (\partial \Sigma_R / \partial \omega)_{E_{\mathbf{k}}}\}^{-1}. \quad (13.12)$$

Применив к (13.12) преобразование Фурье, получим:

$$G(\mathbf{k}, t) = -i Z_{\mathbf{k}} \{ \theta_{\mathbf{k}} \theta_{E_{\mathbf{k}} - \mu} \exp(-iE_{\mathbf{k}} t) \exp(-t/\tau_{\mathbf{k}}) - \theta_{-\mathbf{k}} \theta_{\mu - E_{\mathbf{k}}} \exp(-iE_{\mathbf{k}} t) \exp(t/\tau_{\mathbf{k}}) \} + F(\mathbf{k}, t). \quad (13.13)$$

В соответствии с (13.11), из (13.13) следует

$$N_{\mathbf{k}} = Z_{\mathbf{k}} \theta_{\mu - E_{\mathbf{k}}} + F(\mathbf{k}, 0^-). \quad (13.14)$$

Поскольку $F(\mathbf{k}, 0^-)$ непрерывная функция, функция распределения частиц испытывает скачок при $k=k_0$ с величиной Z_{k_0} , а распределение частиц имеет вид, показанный на рис.8. Отметим, что знание величины скачка позволяет произвести грубейшую оценку изменения массы квазичастиц по выражению (13.6).

Для наблюдения функции распределения частиц не пригодны опыты с малой передачей энергии. Необходимо сообщать частицам энергию, превышающую энергию взаимодействия. К числу таких экспериментов относится, например комптоновское рассеяние рентгеновских лучей. Однако прямого экспериментального доказательства существования распределения типа (13.14) до сих пор не представлено.

13.3 Одетые вершины.

Ряд для собственно энергетической функции, как мы видели ранее, может быть упрощен с помощью перенормировок взаимодействия и функций Грина. В принципе, есть возможность записать этот ряд еще короче, используя всего два слагаемых. Для этого необходимо перенормировать так называемые вершинные части.

Назовем вершинной частью любую диаграмму без внешних линий, которую можно привязать к двум линиям частиц и одной линии взаимодействия (т.е. вставить вместо простой вершины). Пример таких диаграмм показан на рис.66.

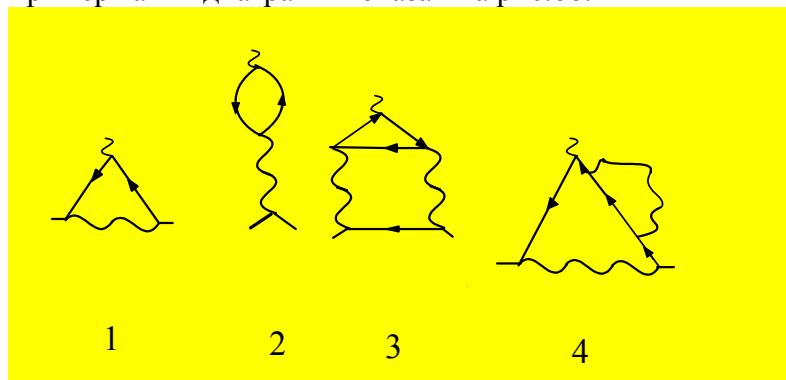


Рис. 66.

Неприводимую вершинную часть нельзя разбить на две путем удаления одной линии частицы или одной линии взаимодействия. На рис.66 неприводимыми являются

вершинные части 1,3,4. Если ввести сумму всех неприводимых вершинных частей так, как это показано на рис. 67, то собственно- энергетическая функция представится рис.68. Легко заметить, что равенство рис.68 следует непосредственно из рис.65.

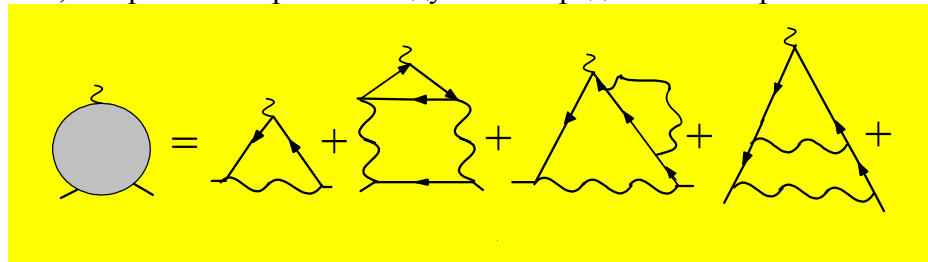


Рис. 67.

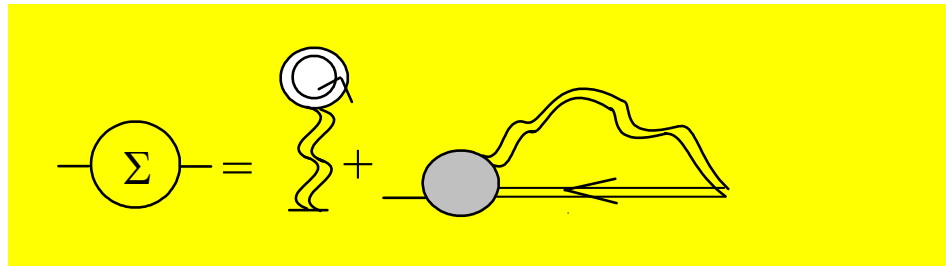


Рис.68.

Не прозевайте: Одетой оказывается только одна из вершин.

Задача: Определить скачок функции распределения и функцию Грина системы, у которой собственно-энергетическая функция вблизи поверхности Ферми имеет вид:

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = A\omega + i B \text{sign}(\mu - \omega) (\omega - \mu)^2.$$

$$A < 0, B > 0.$$

XIV. Энергия основного состояния в приближении хаотических фаз.

..... Здесь все мертво и немо,
Как будто мира наступил конец.
Как навсегда исчерпанная тема,
А.Ахматова.

14.1 Вакуумная амплитуда и энергия основного состояния.

Для вычисления энергии основного состояния по теории возмущений необходимо научиться выписывать члены произвольного порядка обычного ряда теории возмущений:

$$E_0 = W_0 + \langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_0 \rangle + \sum_{m \neq 0} (\langle \Phi_0 | H_1 | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | H_1 | \Phi_0 \rangle) (W_0 - W_m)^{-1} + \dots \quad (14.1)$$

Существует версия нестационарной техники, связанная с разложением так называемой вакуумной амплитуды, позволяющая это сделать.

Вакуумная амплитуда $R(t)$ определяется как амплитуда вероятности того, что если в начальный момент $t=0$ система находилась в вакуумном состоянии с функцией Φ_0 и было включено взаимодействие или внешнее поле, то в момент времени t система опять будет в состоянии Φ_0 . Вакуумная амплитуда радикально отличается от знакомой нам одночастичной функции Грина: последняя описывает динамику одной частицы под влиянием взаимодействия, а вакуумная амплитуда имеет дело с динамикой всей системы частиц.

При отсутствии взаимодействия волновая функция системы в момент времени t будет иметь вид $\Phi_0 \exp(-iW_0 t)$, где W_0 – энергия основного состояния. Состояние системы с взаимодействием в момент t описывается волновой функцией $\Psi(t) = U(t) \Phi_0$, где $U(t)$ – оператор эволюции системы во времени. Вакуумная амплитуда есть ничто иное, как скалярное произведение

$$R(t) = (\Phi_0 \exp(-iW_0 t), \Psi(t)) = \int \Phi_0^* \exp(iW_0 t) U(t) \Phi_0 dr_1 \dots dr_N = \langle \Phi_0 | U(t) | \Phi_0 \rangle \exp(iW_0 t). \quad (14.2)$$

Энергия основного состояния вычисляется с помощью соотношения

$$E_0 = W_0 + \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln R(t). \quad (14.3)$$

Прежде, чем двигаться дальше, докажем соотношение (14.3). К сожалению, доказательство будет довольно длинным. В принципе, его можно и пропустить, сразу перейдя к следующему абзацу. Для доказательства, в первую очередь, нам понадобится явный вид оператора временной эволюции. Функция $\Psi(t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$-iH|\Psi(t)\rangle = \partial |\Psi(t)\rangle / \partial t,$$

в котором гамильтониан не зависит от времени, а оператор временной эволюции соответствует уравнению

$$|\Psi(t)\rangle = U(t-t_0) |\Psi(t_0)\rangle.$$

Прямой подстановкой легко убедиться в том, что оператор временной эволюции имеет вид

$$U(t-t_0) = \exp(-iH(t-t_0)) = 1 - iH(t-t_0) + \frac{1}{2!} H^2(t-t_0)^2 + \dots \quad (14.4)$$

Задача: Найти результат действия оператора временной эволюции на одну из собственных функций Гамильтониана.

Решение: $H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$, $|\Psi(t)\rangle = \exp(-iHt) |\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle \exp(-iE_n t)$.
 $\langle \Psi(t) | = \langle \Psi_n | \exp(iHt) = \exp(iE_n t) \langle \Psi_n |$.

Теперь перепишем определение вакуумной амплитуды (14.2), пользуясь явным видом оператора временной эволюции:

$$R(t) = \exp(iW_0 t) \langle \Phi_0 | \exp(-iHt) | \Phi_0 \rangle. \quad (14.5)$$

Воспользовавшись тем, что оператор $\sum_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$ является единичным перепишем (14.5):

$$R(t) = \exp(iW_0 t) \sum_n \langle \Phi_0 | \exp(-iHt) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Phi_0 \rangle = \exp(iW_0 t) \sum_n \langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Phi_0 \rangle \exp(-iE_n t). \quad (14.6)$$

Взяв от (14.6) логарифм, продифференцировав и перейдя к пределу, получим

$$[d \ln R(t) / dt]_{t \rightarrow \infty} = iW_0 + \left\{ \left[\sum_n \langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle^2 (-iE_n) \exp(-iE_n t) \right] \left[\sum_n \langle \Phi_0 | \Psi_n \rangle^2 \exp(-iE_n t) \right]^{-1} \right\}_{t \rightarrow \infty} \quad (14.7)$$

Все экспоненты стремятся в нуль, поскольку $t \rightarrow \infty$ при $t \rightarrow \infty$. Медленнее всего в нуль обращается экспонента с наименьшей энергией E_0 , поэтому

$$[d \ln R(t) / dt]_{t \rightarrow \infty} = iW_0 + \left\{ \left[\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle^2 (-iE_0) \exp(-iE_0 \infty) \exp(-E_0 \infty) \right] \left[\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle^2 \exp(-iE_0 t) \exp(-E_0 \infty) \right]^{-1} \right\} = iW_0 - iE_0. \quad (14.7)$$

Равенство (14.7) доказывает наше утверждение. Оно справедливо, если $\langle \Phi_0 | \Psi_0 \rangle \neq 0$. Если же симметрия волновых функций основного состояния без взаимодействия и с взаимодействием оказывается различной (включение взаимодействия приводит к фазовому переходу), то равенство (14.7) не справедливо.

Диаграммный ряд для вакуумной амплитуды возникает следующим образом. В отсутствие взаимодействия система находилась в стационарном основном состоянии. При включении взаимодействия исходная волновая функция перестает удовлетворять уравнению Шредингера, система начинает испытывать квантовые флуктуации переходя виртуально в возбужденные состояния и возвращаясь обратно (Последнее утверждение

есть не что иное, как словесное описание процедуры теории возмущений.) В результате таких виртуальных переходов изменяется энергия основного состояния. Соответствующий диаграммный ряд похож на разложение для функции Грина, только он более сложен: наряду со связанными диаграммами в нем появляются диаграммы из двух или более отдельных частей (несвязанные диаграммы). (В обычной не зависящей от времени теории возмущений несвязанные диаграммы соответствуют появлению двух или более сомножителей в порядках теории возмущений выше второго.) Однако логарифм вакуумной амплитуды определяется только суммой связанных диаграмм. Последнее утверждение известно как теорема Бракнера-Голдстоуна о связанных группах. Одно из доказательств этой теоремы базируется на том факте, что в многочастичном случае без учета этой теоремы ряд теории возмущений для энергии расходится пропорционально числу частиц при $N \rightarrow \infty$ [11].

Для системы многих частиц без внешнего потенциала вакуумная амплитуда представляется в виде суммы всех возможных последовательностей взаимодействий, начинающихся и заканчивающихся в основном состоянии, так как это показано на рис. 69. Интерпретация линий на этом рисунке имеет тот же смысл, что и в рядах для функции Грина.

Если же суммировать только связанные диаграммы (как на рис.70), то пользуясь простыми правилами, можно определить энергию основного состояния. Правила для расшифровки диаграмм при вычислении энергии основного состояния мы просто сформулируем ниже без доказательства.

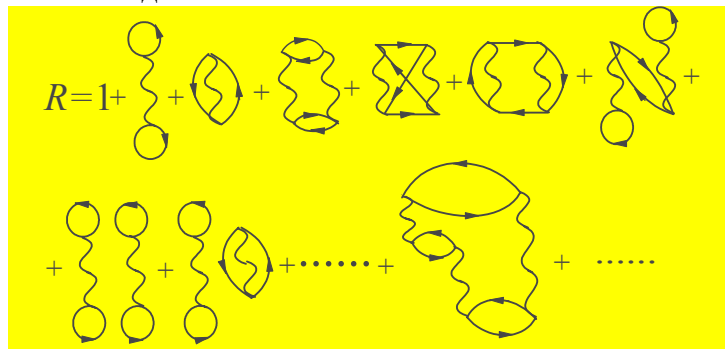


Рис.69.

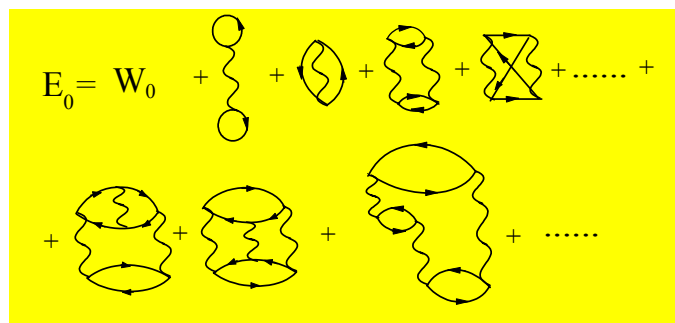


Рис.70.

Как мы видим, часть связанных диаграмм на рис.70 опущена. Во-первых, это диаграммы, получающиеся из изображенных поворотом одной или нескольких волнистых линий взаимодействия на 180° . (При такой процедуре множитель $\frac{1}{2}$ в потенциале взаимодействия исчезает. Он остается только у полностью симметричных диаграмм, типа двойного пузыря.) Специально отметим, что мы здесь имеем дело с диаграммами голдстоуновского типа, в которых порядок времен существен. Топологически эквивалентны только диаграммы с неизменным порядком актов взаимодействия. Во-вторых, отброшены диаграммы, подобные диаграммам второго порядка, показанным на рис.71, не сохраняющие импульс.

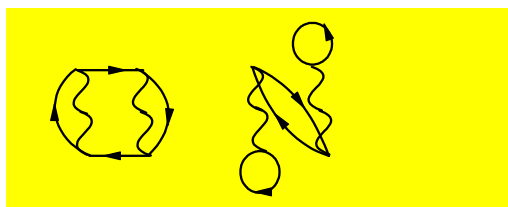


Рис.71.

Сформулируем теперь правила, позволяющие произвести вычисление энергии основного состояния нормальной электронной системы в отсутствие внешнего поля:

Изобразим N вертикальных волнистых линий.

Всеми возможными топологически различными способами, приводящими к связанным диаграммам, соединим вершины волнистых линий направленными линиями так, чтобы в каждой вершине была одна входящая и одна выходящая линии. Проследим, чтобы в каждой вершине импульс сохранялся. Аномальные диаграммы, не сохраняющие импульса, отбросим.

Между каждой парой волнистых линий проведем тонкие пунктирные вертикальные линии.

Воспользуемся правилами рис.72. для перевода диаграммы N-го порядка в аналитическое выражение.

На диаграмме	Множитель
	$(\sum_e - \sum_h)^{-1}$ где \sum_e и \sum_h сумма всех значений ϵ_k , соответственно, для электронных и дырочных линий, пересекающих пунктир.
<p>взаимодействие</p>	V_{klmn} или V_q
<p>дырочная линия</p>	-1
<p>фермионная петля</p>	-1
<p>симметричная диаграмма</p>	1/2
<p>каждый импульс частицы или дырки частицы $k > k_F$, дырки $k < k_F$</p>	$\sum_{\mathbf{k}}$ или $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$

Рис.72.

Задачи:

1. Выписать аналитическое выражение для вклада в энергию от двойного пузыря.

Решение: диаграмма симметрична и содержит две фермионные петли и две дырочные линии.

$$(-1)^4 * 1/2 * \sum_{k, l < k_F} V_{klkl}$$

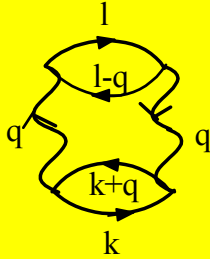
2. *Продумать ту же операцию для «устрицы».*



Решение: диаграмма симметрична и содержит одну фермионную петлю и две дырочные линии.

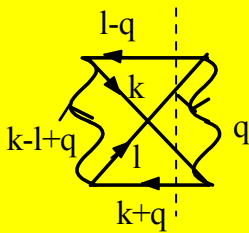
$$(-1)^3 * 1/2 * \sum_{k,l < k_F} V_{lkl}$$

3. *Продумать ту же операцию для диаграммы, показанной ниже на рисунке.*



Решение: $(-1)^4 * 1/2 * \sum_{q,k,l} V_q^2 \frac{1}{(\epsilon_k + \epsilon_l - \epsilon_{k+q} - \epsilon_{l-q})}$; $|k|, |l| < k_F$; $|k+q|, |l-q| > k_F$

4. *Продумать ту же операцию для диаграммы, показанной ниже на рисунке.*



Решение: $(-1)^3 * 1/2 * \sum_{q,k,l} V_q V_{k+q-l} \frac{1}{(\epsilon_k + \epsilon_l - \epsilon_{k+q} - \epsilon_{l-q})}$; $|k|, |l| < k_F$; $|k+q|, |l-q| > k_F$

Обратите внимание, что на последнем рисунке всего одна фермионная петля.

14.2 Энергия основного состояния.

Теперь пришла пора вычислить сумму рис. 70 в приближении хаотических фаз. Последнее соответствует (см. п. 12.3) суммированию только кольцевых диаграмм. Самым грубым приближением для энергии основного состояния будет приближение Хартри-Фока, которое в отсутствии внешнего поля представляет собой просто поправку первого порядка теории возмущений. На языке диаграмм это означает добавку к кинетической энергии вкладов от двойного пузыря и устрицы, причем вклад от двойного пузыря равен нулю, так как $V_{klkl} = V_{q=0} = 0$ из-за наличия компенсирующего фона. Кинетическая энергия системы равна:

$$W_0 = 2 (\hbar^2/2m) \Omega / (2\pi)^3 \int_{k < k_F} k^2 d^3k = \Omega \hbar^2 k_F^5 / (10\pi^2 m). \quad (14.8)$$

Или в пересчете на один электрон

$$W_0/N = 2.21 (r_s)^{-2} \text{ридберг/электрон}. \quad (14.9)$$

Соответствующий интеграл для «устрицы» (см. выше вторую задачу) равен

$$(E_{HF} - W_0)/N = -2/N * 1/2 * [\Omega / (2\pi)^3]^2 * (4\pi e^2 / \Omega) \int_{k,l < k_F} d^3k d^3l |k-l|^{-2} = -0.916 (r_s)^{-1} \text{ридберг/электрон}. \quad (14.10)$$

(В выражениях (14.8) и (14.9) учтен множитель 2, возникший из-за суммирования по спину.)

Корреляционная энергия определяется как разность

$$E_{\text{корр.}} = E_{\text{точн.}} - E_{\text{HF}}$$

и в приближении хаотических фаз равна сумме вкладов от оставшихся кольцевых диаграмм. Рассмотрим более подробно вклад от диаграммы, приведенной выше в третьей задаче п.14.1. Если этот вклад отнормировать на одну частицу, то он равен:

$$-(3/8\pi^5) \int d^3\mathbf{q} q^{-4} \int_{k < k_F, |k+q| > k_F} d^3\mathbf{k} \int_{l < k_F, |l-q| > k_F} d^3\mathbf{l} (q^2 + \mathbf{q}(\mathbf{k}-\mathbf{l}))^{-1} \text{ ридберг/электрон.} \quad (14.11)$$

В выражении (14.11) учтено, что суммирование по спину дает множитель 4. Основной вклад в этот интеграл дают малые значения \mathbf{q} . Концы векторов \mathbf{k} и \mathbf{l} лежат около ферми поверхности в слое толщиной q . При малых q интеграл в (14.11) пропорционален $\int d^3\mathbf{q}/q^3$ или $\int dq/q$ и расходится. Причиной расходимости является дальнедействующий характер кулоновского потенциала.

Аналогично, диаграмма задачи 4 из п.14.1 дает:

$$(3/16\pi^5) \int d^3\mathbf{q} q^{-2} \int_{k < k_F, |k+q| > k_F} d^3\mathbf{k} \int_{l < k_F, |l-q| > k_F} d^3\mathbf{l} (\mathbf{k}-\mathbf{l}+\mathbf{q})^{-2} (q^2 + \mathbf{q}(\mathbf{k}-\mathbf{l}))^{-1} \text{ ридберг/электрон.} \quad (14.12)$$

Подинтегральное выражение этого интеграла пропорционально q при малых q и q^{-4} при больших. (В предыдущем случае каждая из линий взаимодействия переносит импульс q , а в рассматриваемом только одна из них.) Интеграл (14.12) конечен и равен 0.046 ридберг/электрон.

Часть диаграмм третьего порядка показана на рис.73. Они распадаются на группы, причем диаграмма первой группы соответствует переносу импульса q по всем трем волнистым линиям, диаграммы второй группы – только по двум, а третьей – по одной.

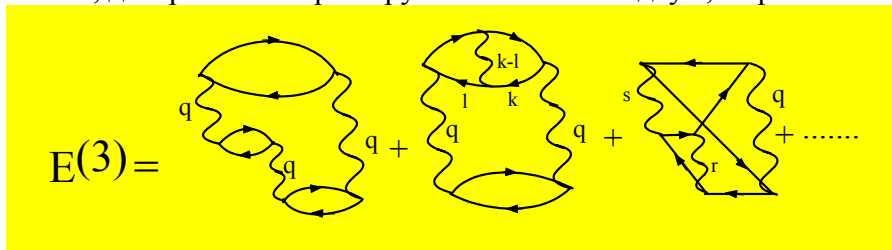


Рис. 73.

Соответственно, аналитическое выражение при малых q может быть представлено в виде:

$$E^{(3)} = r_s (A^{(3)} \int d^3\mathbf{q} q^{-5} + B^{(3)} \int d^3\mathbf{q} q^{-3} + \int d^3\mathbf{q} q^{-1}). \quad (14.13)$$

Наиболее быстро расходящимся является первый член в круглых скобках, соответствующий передаче импульса q по всем волнистым линиям. Также обстоит дело и в высших порядках теории возмущений. Оставляя в каждом порядке расходимости слагаемое нижнего порядка по r_s , получим сумму кольцевых диаграмм, изображенных на рис. 74.:

$$E_{\text{корр}} = 0.046 + A^{(2)} \int d^3\mathbf{q} q^{-3} + r_s A^{(3)} \int d^3\mathbf{q} q^{-5} + r_s^2 A^{(4)} \int d^3\mathbf{q} q^{-7} \dots \quad (14.14)$$

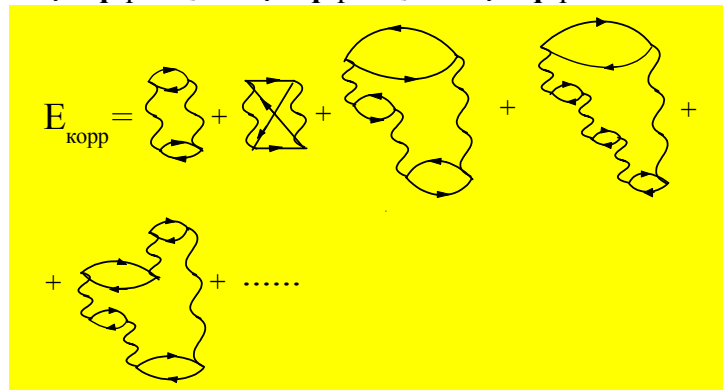


Рис.74.

Поскольку на диаграммах рис.74 существенен временной порядок взаимодействий, провести суммирование довольно сложно. Эта операция была проделана Гелл-Манном и Бракнером со следующим результатом для трехмерных систем:

$$E_{\text{корр}}/N = 0.622 \ln r_s - 0.096 + O(r_s). \quad (14.15)$$

Напомним еще раз, что оба выражения (14.10) и (14.15) справедливы только в пределе высокой электронной плотности $r_s \ll 1$.

Полезно еще раз вычислить энергию основного состояния в приближении хаотических фаз, пользуясь техникой, развитой в первой части нашего курса. Определим энергию взаимодействия как среднее значение потенциальной энергии в основном состоянии:

$$\langle \psi_0 | 1/2 \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{p}', \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^+ c_{\mathbf{p}, \sigma}^+ c_{\mathbf{p}', \sigma'} c_{\mathbf{p}, \sigma'} | \psi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{q}} 1/2 V_{\mathbf{q}} N (S_{\mathbf{q}} - 1). \quad (14.16)$$

Используя определение статического форм фактора и выражение (5.26), формулу для энергии взаимодействия перепишем в виде

$$E_{\text{вз}} = -2\pi e^2 / q^2 * \sum_{\mathbf{q}} \left[\int_0^{\infty} d\omega (\pi)^{-1} \text{Im}[\chi(\mathbf{q}, \omega)] + N \right]. \quad (14.17)$$

Энергия основного состояния E_0 равна

$$E_0 = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | p_i^2 / 2m | \psi_0 \rangle + E_{\text{вз}} \quad (14.18)$$

Введем параметр взаимодействия $\alpha = e^2$. Считая формально этот параметр переменной величиной продифференцируем энергию основного состояния по α . Будем иметь в виду, что в правой части (14.18) от α зависят оба члена:

$$dE_0/d\alpha = \langle \psi_0 | \partial H / \partial \alpha | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | H | \partial \psi_0 / \partial \alpha \rangle + \langle \partial \psi_0 / \partial \alpha | H | \psi_0 \rangle = E_{\text{вз}} / \alpha. \quad (14.19)$$

Последний переход справедлив, поскольку $H_{\text{вз}}$ пропорционален α (см.14.6). Кроме того, сумма последних двух членов в средней части (14.19) равна $\partial / \partial \alpha \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 0$.

Проинтегрировав соотношение (14.19) по α , получим:

$$E_0(e^2) - E_0(0) = \int_0^{e^2} d\alpha / \alpha E_{\text{вз}}(\alpha). \quad (14.20)$$

Осталось подставить в (14.20) выражение для функции реакции плотность-плотность в виде, предсказываемом приближением хаотических фаз:

$$\chi^{\text{RPA}} = \chi^0 (1 - 4\pi e^2 / q^2 * \chi^0)^{-1} \quad (14.21)$$

Вписав в (14.20) кинетическую энергию электронов явно и воспользовавшись соотношением

$$\int_0^{\infty} d\omega \text{Im} [\chi(\mathbf{q}, \omega)] = 1/2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [\chi(\mathbf{q}, i\omega)],$$

получим:

$$E^{\text{RPA}} = E_0^{\text{RPA}} / N = 3/5 \varepsilon_F - \sum_{\mathbf{q}} 2\pi / q^2 N \int_0^{e^2} d\alpha \left\{ N + 1 / (2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \chi^0(\mathbf{q}, i\omega) [1 - 4\pi\alpha / q^2 \chi^0(\mathbf{q}, i\omega)]^{-1} \right\}. \quad (14.22)$$

В последнем выражении интегрирование по константе связи проводится элементарно, а второе интегрирование ведет к ответу (14.15). Интересно отметить, что вычисления именно этим путем привели к уверенности в правильности результата, полученного диаграмматикой.

XV. Двухчастичная функция Грина.

*Я и тень моя вдвоем
Бросим взоры в водоем.
Велимир Хлебников.*

15.1 Определение двухчастичной функции Грина.

Определим двухчастичную функцию Грина $G_2(\mathbf{r}_4, t_4, \dots, \mathbf{r}_1, t_1)$ как амплитуду вероятности того, что если одна частица введена в систему в момент t_1 в точку \mathbf{r}_1 , а вторая в точку \mathbf{r}_3 в момент t_3 , то позже одна из частиц окажется в токе (\mathbf{r}_2, t_2) , а другая – (\mathbf{r}_4, t_4) . Определенную так функцию Грина можно представить в виде суммы амплитуд всех возможных виртуальных процессов, как это показано на рис. 75.

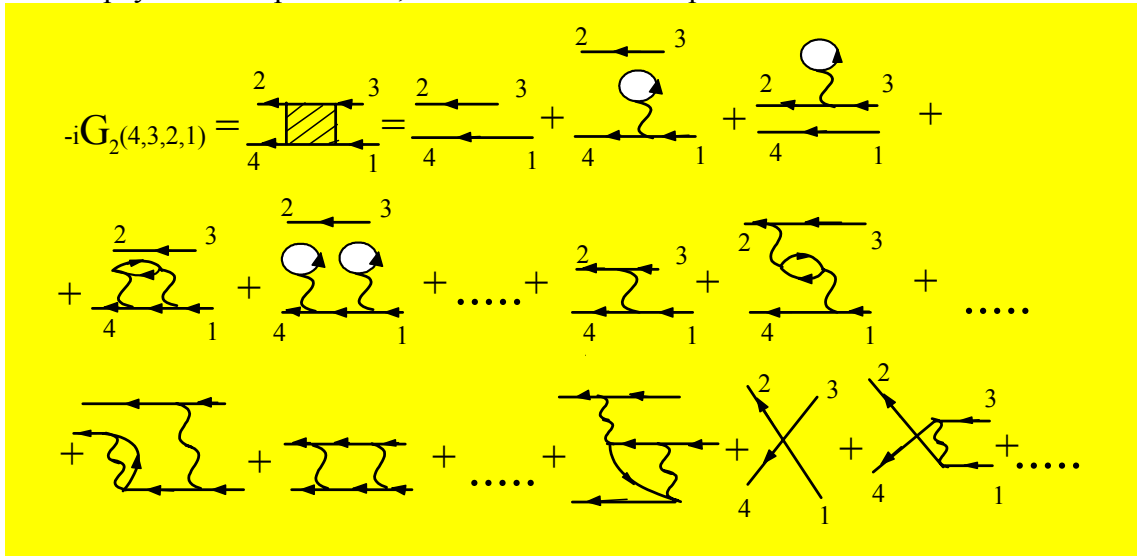


Рис.75.

Можно сменить порядок следования времен. Например, двухчастичная функция Грина в канале частица-дырка $G_2(t_3 > t_4 > t_1 > t_2)$ определяется как амплитуда вероятности того, что если в точку (\mathbf{r}_1, t_1) введена частица, а из точки (\mathbf{r}_2, t_2) частица удалена (введена дырка), то в точке (\mathbf{r}_3, t_3) будет обнаружена дырка, а в (\mathbf{r}_4, t_4) – частица (см. рис. 76).

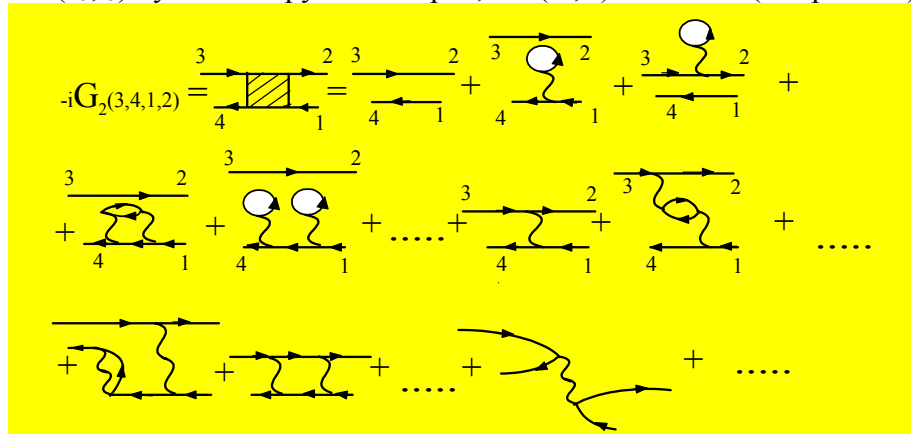


Рис.76.

С помощью оператора упорядочения во времени можно записать все возможные определения двухчастичной функции Грина при всех возможных следованиях времен:

$$G_2(4,3,2,1) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \psi(\mathbf{r}_4, t_4) \psi^+(\mathbf{r}_3, t_3) \psi(\mathbf{r}_2, t_2) \psi^+(\mathbf{r}_1, t_1) \} | \Psi_0 \rangle, \quad (15.1)$$

где операторы $\psi(\mathbf{r}, t)$ и $\psi^+(\mathbf{r}, t)$ операторы уничтожения и рождения частицы в точке \mathbf{r} в момент времени t .

15.2 Плазмоны.

В многочастичной среде регулярные изменения плотности частиц соответствуют коллективным возбуждениям. Такие волны могут быть описаны функцией Грина, задающей распространение флуктуаций плотности от точки к точке. Ее легко построить, пользуясь выражением (15.1) и положив в нем $(\mathbf{r}_4, t_4) = (\mathbf{r}_3, t_3)$ и $(\mathbf{r}_2, t_2) = (\mathbf{r}_1, t_1)$. Эта операция приводит нас к функции Грина для флуктуаций плотности:

$$F(\mathbf{r}, t) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \psi^+(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \psi^+(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) \} | \Psi_0 \rangle. \quad (15.2)$$

Не прозевайте: по определению оператора упорядочения во времени при совпадающих временах оператор рождения располагается слева.

Оператор числа частиц в единичном объеме в точке (\mathbf{r}, t) равен

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \psi^+(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = \exp(iHt) \psi^+(\mathbf{r}) \exp(-iHt) \exp(iHt) \psi(\mathbf{r}) \exp(-iHt) = \\ &= \exp(iHt) \psi^+(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \exp(-iHt). \end{aligned} \quad (15.3)$$

С помощью этого оператора можно переписать функцию Грина для флуктуаций плотности в виде, проясняющем ее физический смысл. В случае не зависящего от времени гамильтониана и однородной системы без внешних полей:

$$F(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) = -i \langle \Psi_0 | T \{ \rho(\mathbf{r}_2, t_2) \rho^+(\mathbf{r}_1, t_1) \} | \Psi_0 \rangle, \quad (15.4)$$

где учтено, что электронная плотность есть действительная величина. Из (15.4) мы заключаем, что функция $F(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, t_2 - t_1)$ создает возмущение плотности в точке (\mathbf{r}_1, t_1) и переносит его в (\mathbf{r}_2, t_2) . Диаграммное разложение этой функции показано на рис. 77.

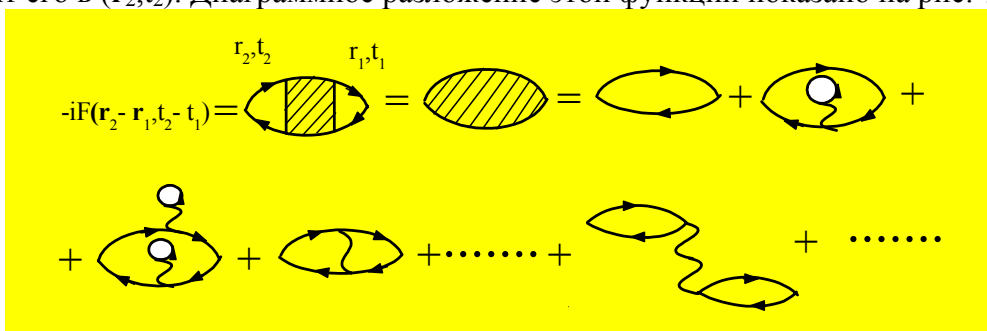


Рис.77

Рассматривая уравнение рис.77 в (\mathbf{k}, ω) пространстве и пользуясь определением эффективного перенормированного потенциала взаимодействия (рис. 58а), получим:

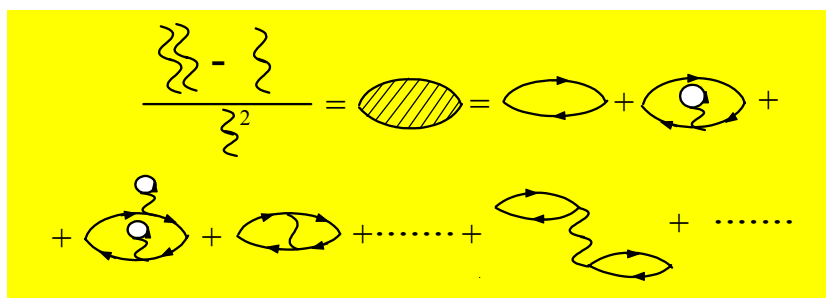


Рис. 78.

Выразив поляризационную функцию Грина через сумму всех неприводимых поляризационных частей (см. рис. 60), получим окончательно:

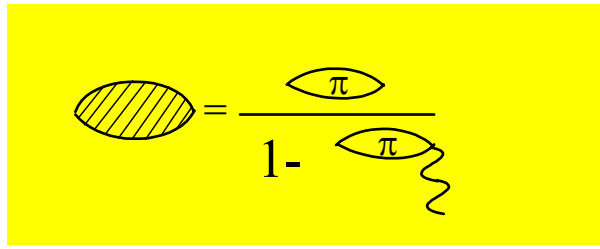


Рис. 79.

В аналитическом виде рис. 79 соответствует уравнению

$$F(\mathbf{k}, \omega) = \pi(\mathbf{k}, \omega) / \varepsilon(\mathbf{k}, \omega). \quad (15.5)$$

Разложим (15.5) вблизи полюсов. Для этого сначала выделим в явном виде действительную и мнимую части поляризационного оператора:

$$F(\mathbf{k}, \omega) = (\pi_R + i\pi_I) / (1 + V_k \pi_R + iV_k \pi_I). \quad (15.6)$$

Определим теперь набор частот Ω_k как результат решения уравнения:

$$1 + V_k \pi_R(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (15.7)$$

Теперь разложим $\pi_R(\mathbf{k}, \omega)$ в ряд возле Ω_k , приняв во внимание, что симметрия по времени требует появления только четных степеней ω .

$$\pi_R(\mathbf{k}, \omega) = \pi_R(\mathbf{k}, \Omega_k) + (\partial \pi_R / \partial \omega^2)_{\Omega_k} (\omega^2 - \Omega_k^2) + \dots \quad (15.8)$$

Подставив разложение (15.8) в формулу (15.6) с учетом соотношения (15.7) получим функцию Грина, типичную для коллективных возбуждений:

$$F(\mathbf{k}, \omega) = (2\Omega_k / V_k) \pi(\mathbf{k}, \Omega_k) / (\partial \pi_R / \partial \omega)_{\Omega_k} * [\omega^2 - \Omega_k^2 + 2i\Omega_k \pi_I (\partial \pi_R / \partial \omega)_{\Omega_k}^{-1}]. \quad (15.9)$$

Коллективные возбуждения будут слабозатухающими при условии

$$\tau^{-1} = \pi_I (\partial \pi_R / \partial \omega)_{\Omega_k}^{-1} \ll \Omega_k. \quad (15.10)$$

В случае электронного газа высокой плотности в поляризационном операторе можно оставить только одну диаграмму (см. рис 80) и заменить в (15.9) $\pi(\mathbf{k}, \omega)$ на $\pi_0(\mathbf{k}, \omega)$.

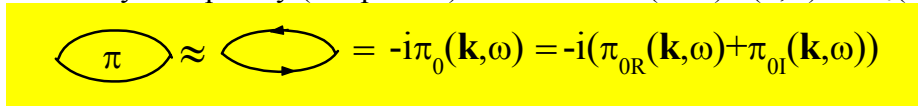


Рис.80.

Где величина $i\pi_0(\mathbf{k}, \omega)$ задана выражением (12.9) и может быть выражена через функцию реакции плотность-плотность свободного электронного газа. Результат соответствующих

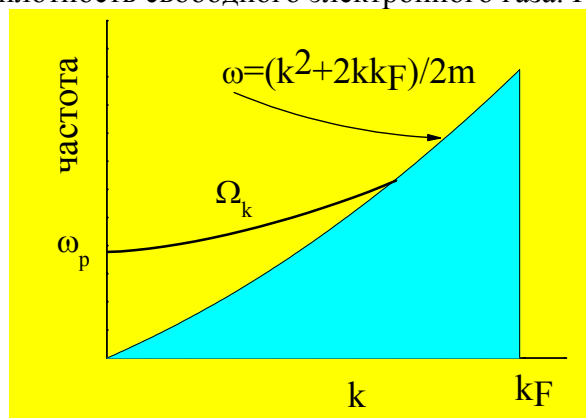


Рис.81.

вычислений показан на рис.81. В незакрашенной области $\pi_{0I} = 0$ и плазмоны имеют в рассмотренном приближении бесконечное время жизни. Кривая дисперсии таких

свободных плазмонов начинается с классической плазменной частоты. Если к учтенной нами диаграмме добавить поляризационные части высших порядков, то плазмон становится «одетым» квазиплазмоном с конечным временем жизни.

15.3 Вершинная функция и рассеяние квазичастиц.

Рассмотрим двухчастичную функцию Грина в импульсно-частотном представлении. Однородность системы в пространстве и времени требует, чтобы функция зависела только от разностей координат и времен, что в импульсном представлении соответствует условию

$$P_1 + P_3 = P_4 + P_2,$$

где заглавными буквами обозначены 4-векторы.

Задача: Покажите справедливость выписанного выше равенства.

Решение: Однородность пространства означает, что функция зависит только от трех независимых аргументов, разностей $X_4 - X_3$, $X_2 - X_3$, $X_1 - X_3$.

Переход к импульсному представлению предполагает умножение координатной функции на экспоненту с показателем $P_4 X_4 + P_2 X_2 - P_3 X_3 - P_1 X_1 = P_4(X_4 - X_3) + P_2(X_2 - X_3) - P_1(X_1 - X_3) - X_3(P_1 + P_3 - P_2 - P_4)$. Поскольку зависимости отдельно от X_3 быть не может, то член в круглых скобках равен нулю..

В нулевом приближении функцию Грина можно изобразить двумя диаграммами

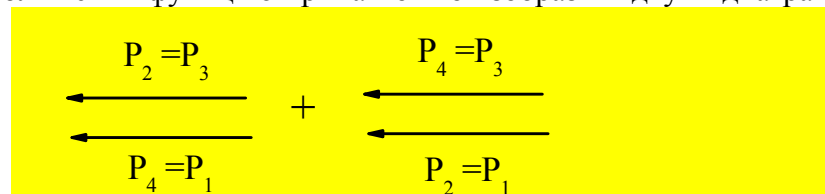


Рис. 82.

В первом порядке теории возмущений, во-первых, появляются поправки к каждому из сомножителей у двух слагаемых рис.82, как это показано, например, на рис.83,

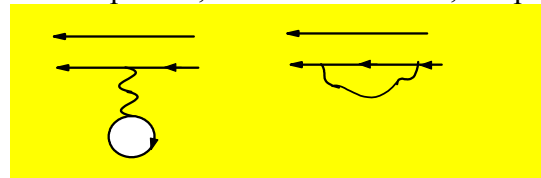


Рис.83.

а во-вторых, диаграммы, не разбивающиеся на две отдельные части (рис. 84).

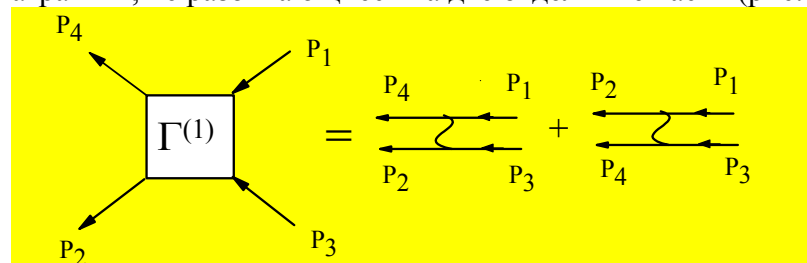


Рис.84.

В более высоких порядках возникают поправки к двум не соединенным между собой линиям (суммирование таких диаграмм дает вместо каждой свободной одночастичной функции Грина точную одночастичную функцию), такие же поправки к сплошным линиям рис.84, и, наконец, поправки, образующие фигуру, заменяющую волнистые линии рис.84. Сумма всех поправок последнего типа называется вершинной функцией $i\Gamma$.

Не прозевайте: Вершинная функция, подобно массовому оператору, не включает входящих и выходящих стрелок.

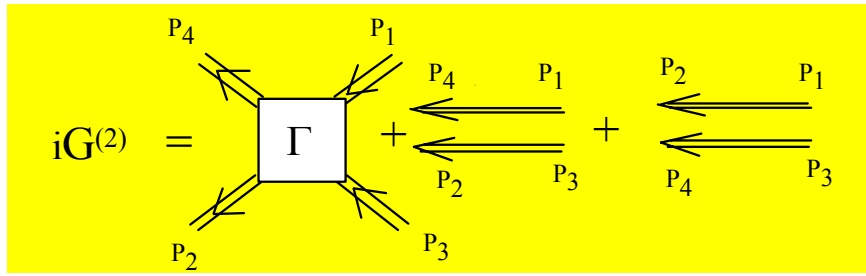


Рис.85

Правила, позволяющие выписать аналитические соотношения по рис.85 дополняются следующим условием: если последовательностью сплошных линий связаны концы 1,2 и 3,4, то знак диаграммы изменяется на обратный. Во втором порядке теории возмущений, например, вершинная функция задана диаграммами

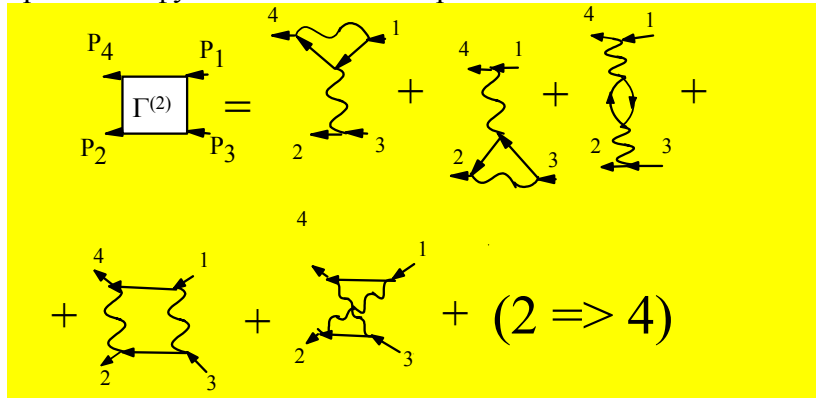


Рис. 86.

где скобкой обозначены те же диаграммы с заменой ($P_2 \rightarrow P_4$).

Как видно из рис.85, вблизи полюсов одночастичной функции Грина вершинная функция задает амплитуду вероятности рассеяния квазичастиц с импульсами P_1, P_3 друг на друге с конечными состояниями рассеянных частиц в P_2 и P_4 . Одночастичная гриновская функция жидкости вблизи полюса отличается от гриновской функции идеального газа только множителем Z (см. (13.12)). Если ввести квазичастицы, то для них гриновская функция вблизи полюса будет выглядеть как функция идеального газа, $G(\mathbf{k}, \omega) = G_{\text{кв}}(\mathbf{k}, \omega) Z_{\text{к}}$. Соответственно, $\Gamma = \Gamma_{\text{кв}} * Z^2$. Поэтому число столкновений квазичастиц в единице объема в единицу времени может быть вычислено интегрированием выражения (15.11):

$$dW = 2\pi |Z^2 \Gamma(4,3,2,1)|^2 \delta(\varepsilon_4 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_1) n_{p_1} n_{p_3} (1 - n_{p_2}) (1 - n_{p_4}) (2\pi)^{-9} d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p_3. \quad (15.11)$$

Здесь $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_4$ и учтен принцип Паули. Обратим внимание, что небольшое увеличение массы квазичастиц за счет взаимодействия (п. 13.2) приводит к значительному ослаблению рассеяния квазичастиц друг на друге.

Можно ввести неприводимую вершинную часть (неразрезаемый кирпич) $\Gamma(p_1, p_2, p_3, p_4)$ как такую часть вершинной функции, которую нельзя разбить на части, соединенные только двумя одночастичными функциями (рис.86а).

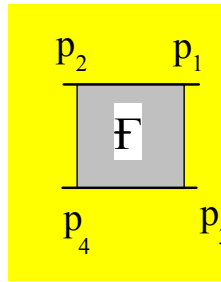


Рис.86а.

Диаграммы, определяющие неприводимую вершинную часть, показаны на рис 86^б.

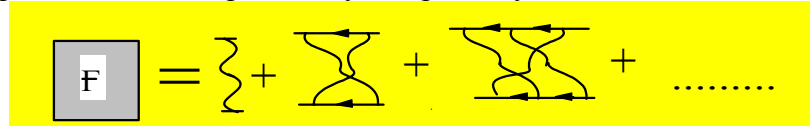


Рис.86^б.

Существует уравнение Бете- Солпитера типа уравнения Дайсона, связывающее неприводимую вершинную часть с приводимой вершинной функцией (рис. 86^б). В его справедливости легко убедиться, сортируя диаграммы по числу двухчастичных сечений.

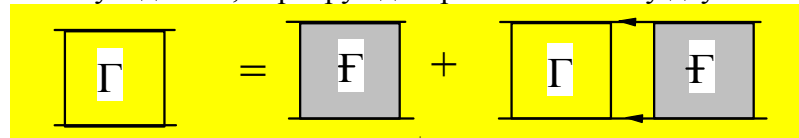
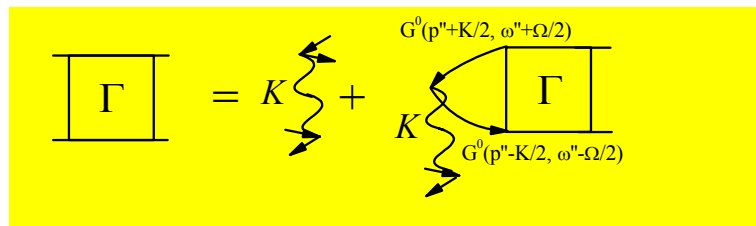


Рис. 86^в.

Задача: Пользуясь наипростейшим приближением для F, в котором уничтожается электрон-дырочная пара с импульсом K и рождается электрон-дырочная пара с тем же импульсом, решить уравнение Бете- Солпитера и получить выражение (15.7), определяющее спектр плазмонов. (Поскольку в каждом взаимодействии в системе будет сохраняться общий избыточный импульс K и энергетический параметр Omega, решение будет соответствовать коллективной моде с этим импульсом и этой энергией.)

Решение: Выписываем уравнение, аналогичное (12.4). В графическом виде оно имеет форму:



Или, в аналитическом виде:

$$\Gamma(K, \Omega) = V(K) + V(K) i \int G^0(p''+K/2, \omega''+\Omega/2) G^0(p''-K/2, \omega''-\Omega/2) \Gamma(K, \Omega) d\omega'' dp'' = \\ = V(K)(1 - \Gamma(K, \Omega) \pi^0(K, \Omega)), \quad |p''+K/2| > p_F, \quad |p''-K/2| < p_F, \quad |\omega''+\Omega/2| > \epsilon_F, \quad |\omega''-\Omega/2| < \epsilon_F. \quad \text{Откуда} \\ \text{мгновенно получаем (15.7).}$$

15.4. Экситоны.

Рассмотрим теперь задачу о спектре двух частиц с различными массами m_1 и m_2 , которые взаимодействуют по закону $V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = -\delta(t_2 - t_1) e^2 / |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$, т.е. частицы имеют заряды противоположного знака, а запаздыванием взаимодействия мы пренебрегаем. Конечно, в простейшем случае решение может быть найдено непосредственно с помощью уравнения Шредингера, однако, если одной из частиц является дырка в полупроводнике, задача становится многочастичной и так просто уже не решается.

Прежде всего запишем уравнение Бете-Солпитера в подробной аналитической форме:

$$\Gamma(p_i) = F(p_i) + i \int F(p'_i) G(p_{i+}) G(p_{i-}) \Gamma(p_i'') d^4q / (2\pi)^4. \quad (15.12)$$

Здесь для краткости записи введены обозначения:

$p_i = \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$, $p'_i = \{p_1, p_2, p_{1+}, p_{2-}\}$, $p''_i = \{p_{1+}, p_{2-}, p_3, p_4\}$, $p_{i+} = p_i + q$, $p_{i-} = p_i - q$. Все векторы в качестве четвертой компоненты включают энергетический параметр. При отсутствии запаздывания $V(\mathbf{q}, \omega) = V(\mathbf{q}) = -4\pi e^2/q^2$ в трехмерном случае. В уравнении (15.12) можно ограничиться самым грубым приближением для F , подобно тому, как это было сделано в уравнении (12.4) и на рис.54.

$$F(p'_i) = V(q) \quad (15.13)$$

Самое замечательное состоит в том, что такое приближение при отсутствии запаздывания оказывается точным. (доказательство этого утверждения интересующиеся могут найти в четвертой главе книги [3].) Изобразим уравнение (15.12) на графике:

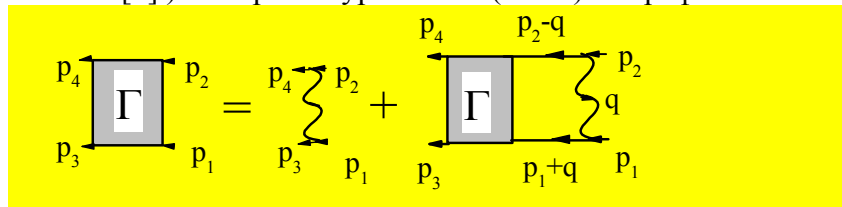


Рис.87.

Заметим, что если F не зависит от частоты, то и G от частоты не зависит тоже. Вся зависимость от частоты ω под интегралом (15.12) определяется произведением гриновских функций $G(p_{1+})G(p_{2-})$, которое в случае двух частиц (или двух квазичастиц) должны равняться произведению свободных функций Грина $G^0(p_{1+})G^0(p_{2-})$.

$$i \int G^0(\Omega - \omega_2 - \omega - p_{1+}^2/2m_1) G^0(\omega_2 - p_{2-}^2/2m_2 + \omega) d\omega/2\pi = [\Omega - p_{1+}^2/2m_1 - p_{2-}^2/2m_2 + i0]^{-1}, \quad (15.14)$$

где Ω - суммарный энергетический параметр, а ω_2 - энергетический параметр частицы с импульсом p_2 .

Разделим движение на движение центра масс и относительное движение.

$\mathbf{P} = \mathbf{p}_{1+} + \mathbf{p}_{2-} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$, импульсы относительного движения $\pm \mathbf{k}$ до взаимодействия и $\pm (\mathbf{k} + \mathbf{q})$ после, $p_{1+}^2/2m_1 + p_{2-}^2/2m_2 = P^2/2M + (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2/2\mu$, где μ - приведенная масса.

В системе, связанной с центром масс, уравнение Рис.87 запишется в виде:

$$\Gamma_\Omega(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = U(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + \int U(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \Gamma_\Omega(\mathbf{q}, \mathbf{k}_1) [\Omega_0 - q^2/2\mu + i0]^{-1} d^3q/(2\pi)^3. \quad (15.15)$$

где $\Omega_0 = \Omega - P^2/2(m_1 + m_2)$.

Функция, стоящая под интегралом, имеет полюса при некотором значении суммарного импульса P . Поскольку первый член правой части уравнения (15.15) полюсов не имеет, то мы его отбросим, а вблизи n -го полюса будем искать решение уравнения (15.15) в виде:

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = (\Omega - P^2/2(m_1 + m_2) - k^2/2\mu) \psi(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}_1) (\Omega - P^2/2(m_1 + m_2) - k_1^2/2\mu) [\Omega - E_n(P) + i0]^{-1}, \quad (15.16)$$

где E_n - энергия новой квазичастицы.

После подстановки (15.16) в (15.15) получим уравнение на функцию $\psi(\mathbf{k})$:

$$(\Omega - P^2/2(m_1 + m_2) - k^2/2\mu) \psi(\mathbf{k}) = \int U(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}) d^3q/(2\pi)^3 \quad (15.17)$$

Последнее уравнение есть не что иное, как фурье-образ уравнения Шредингера, соответствующего движению водородоподобной частицы как целого при наличии внутренних степеней свободы, также подобным состояниям атома водорода. Как мы помним, решение этого уравнения даст набор собственных функций и набор собственных энергий Ω_n . Последние и определяют положение полюсов.

В полупроводниках электроны проводимости взаимодействуют с дыркой валентной зоны, поэтому в знаменатель одночастичной электронной функции Грина следует добавить энергию щели, а соответствующее двухчастичное возбуждение будет экситоном.

XVI. Электроны в случайном потенциале.

*Все это может показаться
Смешным и устарелым нам,
Но, право, может только хам*

16.1 Амплитуда рассеяния.

Если плоская волна $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ рассеивается на потенциале $V(\mathbf{r})$, то на больших расстояниях от рассеивающего центра волновая функция имеет вид суперпозиции:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})/r = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + \chi(\mathbf{r}). \quad (16.1)$$

Здесь $\mathbf{n}=\mathbf{r}/r$. Функция $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ называется амплитудой рассеяния. Теперь, аналогично тому, как это было сделано в десятой главе (уравнения 10.17-10.19), запишем уравнение на функцию Грина при наличии рассеивающего потенциала:

$$\{(2m)^{-1} \nabla^2 + i \partial / \partial t - U(\mathbf{r})\} G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \delta(t-t')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (16.2)$$

В отсутствие рассеивателей соответствующее уравнение удовлетворяется, например запаздывающей свободной функцией Грина:

$$G_0^+(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t') = \iint G_0^+(\mathbf{k}, \omega) \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-i\omega(t-t')\} d\omega/2\pi d^3\mathbf{k}/(2\pi)^3, \quad (16.3)$$

где, как и ранее,

$$G_0^+(\mathbf{k}, \omega) = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta)^{-1}.$$

Уравнение Шредингера с волновой функцией (16.1) можно записать в операторном виде следующим образом:

$$\hat{G}^{-1} \chi(\mathbf{r}) = (\hat{G}_0^{-1} - \hat{U}) \chi(\mathbf{r}) = \hat{U} |\mathbf{k}\rangle \quad (16.4)$$

Прямой подстановкой легко убедиться, что (16.4) удовлетворяется функцией

$$\chi(\mathbf{r}) = \int d^3r' G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}') = \langle \mathbf{r}' | \hat{G} \hat{U} | \mathbf{k} \rangle. \quad (16.5)$$

Здесь функция Грина может быть разложена по возмущающему потенциалу точно так, это было сделано на Рис.40:

$$\chi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}' | \hat{G}_0 \hat{U} + \hat{G}_0 \hat{U} \hat{G}_0 \hat{U} + \dots | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{r}' | \hat{G}_0 \mathbf{F} | \mathbf{k} \rangle, \quad (16.6)$$

где введен оператор $\mathbf{F} = \hat{U} + \hat{U} \hat{G}_0 \hat{U} + \hat{U} \hat{G}_0 \hat{U} \hat{G}_0 \hat{U} + \dots$, описывающий многократное рассеяние на потенциале V . Из определения оператора \mathbf{F} следует, что этот оператор подчиняется интегральному уравнению

$$\mathbf{F} = \hat{U} + \hat{U} \hat{G}_0 \mathbf{F}. \quad (16.6)$$

Теперь найдем асимптотику $\chi(\mathbf{r})$ на больших расстояниях. Запишем \mathbf{r} как $\mathbf{r} = R\mathbf{n}$ и разложим разность $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx R - |\mathbf{r}'| \cos\theta$, где θ - угол между \mathbf{r} и \mathbf{r}' . Подставив в (16.6) результат решения задачи из п.10.2, получим:

$$\chi(\mathbf{r}) = -m/(2\pi) \int d^3r' \exp[i\kappa(R - |\mathbf{r}'| \cos\theta)] R^{-1} F(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}') = -m/(2\pi R) \exp[i\kappa R] \int d^3r' \exp[-i\kappa|\mathbf{r}'| \cos\theta] F(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}'). \quad (16.7)$$

Сравнивая полученное выражение с определением (16.1), мы приходим к равенству, связывающему $F(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ с амплитудой рассеяния

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = -m/(2\pi) \int d^3r' \exp[-i\kappa|\mathbf{r}'| \cos\theta] F(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}') = -m/(2\pi) F(\mathbf{k}, \mathbf{k}). \quad (16.8)$$

Введенная здесь функция $F(\mathbf{k}, \mathbf{k})$ называется амплитудой рассеяния в энергетической нормировке. Именно такая амплитуда рассеяния возникает естественным образом при решении задач о рассеянии диаграмными методами.

Не прозевайте: Выше, как и ранее предполагались единицы, в которых $\hbar=1$. В обычных единицах коэффициент перед интегралом в (16.8) равен $-m/(2\pi \hbar^2)$

В импульсном представлении уравнение (16.6) имеет вид:

$$F(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) + 2m \int d^3q/(2\pi)^3 V(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) \{k_1^2 - q^2 + i\delta\}^{-1} F(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}). \quad (16.9)$$

Решая (16.9) итерациями, можно вновь получить ряд для F .

Задача: Найти связь между f и F в двумерном случае.

Решение: Прежде всего нам нужно найти решение задачи из п.10.2 в двумерном случае.

$$G_0^+(\mathbf{r}-\mathbf{r}', \omega) = (2\pi)^{-2} \int d^2k \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')) (\omega - k^2/2m + i\eta)^{-1} \approx m/[2\pi k|\mathbf{r}|]^{1/2} \exp(i\mathbf{k}|\mathbf{r}| + i\pi/4)$$

$k|r| \gg 1$. Подставив это выражение в (16.6), получим $f = -F_m/[2\pi k]^{1/2}$.

16.2 Оптическая теорема для рассеяния.

Для любого процесса рассеяния имеется связь между его вероятностью и мнимой частью амплитуды рассеяния. Эта связь задается соотношением унитарности, имеющем в трехмерном случае вид:

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') - f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = ik/(2\pi) \int d\omega'' f(\mathbf{n}, \mathbf{n}'') f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}''). \quad (16.10)$$

где \mathbf{n} задает направление падающей волны, а \mathbf{n}' - рассеяной. Соотношение (16.10) выведено в п.124 Квантовой механики Ландау и Лифшица. Здесь мы кратко повторим этот вывод.

Всякая линейная комбинация функций типа (16.1) задает возможный процесс рассеяния. Возьмем их произвольную линейную комбинацию и проинтегрируем по телесному углу между \mathbf{n} и \mathbf{n}' .

$$\int d\omega R(\mathbf{n}) \exp(ikr\mathbf{n}\mathbf{n}') + \exp(ikr)/r \int d\omega R(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \quad (16.11)$$

Первый интеграл в (16.11) легко вычисляется, поскольку основной вклад в него вносит окрестность точек $\mathbf{n} = \pm \mathbf{n}'$:

$$2\pi i R(-\mathbf{n}')/kr \exp(-ikr) - 2\pi i R(\mathbf{n}')/kr \exp(ikr) + \exp(ikr)/r \int d\omega f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') R(\mathbf{n}) \quad (16.12)$$

В этом выражении первый член соответствует волне, сходящейся к центру, а два последующих - волне, расходящейся от центра. Оно может быть переписано с помощью нового оператора (S матрицы Гейзенберга) в виде:

$$R(-\mathbf{n}')/r \exp(-ikr) - \exp(ikr)/r \hat{S} R(\mathbf{n}'). \quad (16.13)$$

Здесь $\hat{S} = 1 + 2k\hat{g}$, $\hat{g} R(\mathbf{n}') = \int d\omega f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') R(\mathbf{n})$. Как сходящиеся к центру, так и расходящиеся волны должны образовывать систему ортонормированных функций. Поэтому оператор \hat{S} обязан быть унитарным:

$$\hat{S} \hat{S}^+ = 1.$$

Раскрыв это выражение получим условие на оператор \hat{g} :

$$\hat{g} - \hat{g}^+ = 2ik \hat{g} \hat{g}^+. \quad (16.14)$$

Отсюда мгновенно получаем условие для амплитуды рассеяния:

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}') - f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = ik/2\pi \int d\omega'' f(\mathbf{n}, \mathbf{n}'') f^*(\mathbf{n}', \mathbf{n}''). \quad (16.15)$$

Положив в (16.15) $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$ (т.е. рассматривая только рассеяние на нулевой угол) и проинтегрировав по углам мы обнаруживаем, что полное сечение рассеяния и мнимая часть амплитуды рассеяния на нулевой угол пропорциональны друг другу.

$$\text{Im } f(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = k/(4\pi) \int d\omega'' |f(\mathbf{n}, \mathbf{n}'')|^2, \quad (16.16)$$

Последнее равенство известно как оптическая теорема о рассеянии.

Задача Записать равенство (16.15) для амплитуды рассеяния в энергетической нормировке F в трехмерном и двумерном случаях.

Ответ: В трехмерном случае

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - F^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -ikm/(2\pi)^2 \int d\omega_q F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) F^*(\mathbf{k}', \mathbf{q}).$$

Чтобы найти ответ в двумерном случае см. решение задачи предыдущего параграфа.

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - F^*(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -im/(2\pi) \int d\omega_q F(\mathbf{k}, \mathbf{q}) F^*(\mathbf{k}', \mathbf{q}).$$

16.3 Усреднение по беспорядку.

Ниже мы рассмотрим задачу об упругом рассеянии невзаимодействующих электронов на примесях. В самом грубом приближении мы можем пренебречь взаимодействием, поскольку, как мы уже видели, его роль сводится к перенормировке констант, описывающих квазичастицы. Гамильтониан взаимодействия запишем в виде:

$$H_{\text{int}} = \int U(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r, \quad (16.17)$$

где $U(\mathbf{r}) = \sum_i u(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$, число примесей n_i будем считать малым по сравнению с числом электронов, а саму примесь точечной $u(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) = u_0 \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$. Точечность примеси означает, что амплитуда рассеяния не зависит ни от угла рассеяния, ни от энергии рассеиваемой частицы. Кроме того будем предполагать, что величина u_0 достаточно мала для того, чтобы рассматривать рассеяние в рамках борновской теории рассеяния. Функция Грина для электронов, движущихся в потенциале (16.17) дается суммой диаграмм, представленных на рис. 29. Функция Грина для каждого конкретного расположения примесей не является трансляционно инвариантной, однако усредненная по случайному расположению примесей функция Грина будет обладать трансляционной инвариантностью.

Рассмотрим сначала ту часть диаграмм, изображенную на рис. 87, на которой номера всех примесей различны.

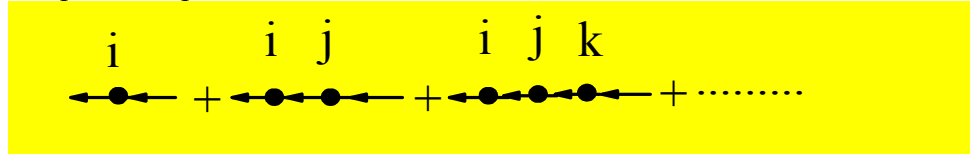


Рис. 87.

Учет всех таких процессов приведет к сдвигу энергии квазичастиц и химического потенциала на ту величину, на которую изменяется средняя энергия $n_i u_0$ при введении рассеивателей. Как мы видели в девятой главе, время релаксации определяется квадратом матричного элемента, и, следовательно, квадратом матричного элемента (вторым порядком по рассеянию) будет определяться мнимая часть функции Грина. Значит для нас интерес будут представлять диаграммы, в которые одна и та же примесь входит два раза. Отметим такие процессы, соединив соответствующие вершины штриховой линией так, как это показано на рис. 88.

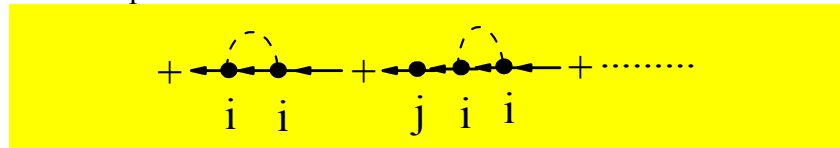


Рис.88.

Штриховая линия будет рассматриваться как новый элемент диаграммной техники. Усреднение по примесям дает для нее следующее выражение:

$$\sum_i \langle u(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i) u(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_i) \rangle = n_i u_0^2 \delta^{(3)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (16.18)$$

Передача энергии по штриховой линии равна нулю, поскольку рассеяние упругое.

При усреднении какой-либо величины по беспорядку основной вклад дают графики, в которых пунктирные линии не пересекаются. Подробно это утверждение будет обсуждаться ниже, а пока мы вычислим среднее от функции Грина в импульсном и координатном представлениях учитывая только графики с непересекающимися линиями.

Фурье-компонента потенциала примеси имеет вид:

$$u(\mathbf{p}) = \int u(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}) d^3r. \quad (16.19)$$

Соответственно, уравнение (16.17) заменится на

$$H_{int} = \sum_i H_{int}^i,$$

где $H_{int}^i = \iint \psi^+(\mathbf{p}) u(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \psi(\mathbf{p}') \exp[i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}_i] d^3p d^3p' / (2\pi)^6$.

Мы стартуем с суммирования усредненных по беспорядку диаграмм рис.87, добавив, естественно, диаграмму, соответствующую свободной функции Грина. Последняя диаграмма не зависит от беспорядка и равна

$$G_0(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = (2\pi)^3 G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \quad (16.20)$$

Следующее слагаемое представляет собой сумму $G^{(1)}(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_i G^{(1)}_i$, где

$$G^{(1)}_i(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = G_0(\varepsilon, \mathbf{p}) u(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \exp[i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}_i] G_0(\varepsilon, \mathbf{p}'). \quad (16.21)$$

Считая объем системы единичным и усреднив по случайному распределению примесей с помощью соотношения:

$$\langle \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \rangle = \int d^3\mathbf{r}_i \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}) \quad (16.22)$$

получим

$$G^{(1)}(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_i \langle G^{(1)}_i(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') \rangle = \sum_i |G_0(\mathbf{p})|^2 u_0 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') = n u_0 |G_0(\mathbf{p})|^2 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \quad (16.23)$$

Теперь рассмотрим вторую диаграмму рис.87. В общем случае нам нужно будет суммировать процессы последовательного рассеяния на двух различных примесях и процессы рассеяния на одной и той же примеси. Нам нужно усреднить по расположению примесей выражение:

$$\sum_{ij} G^{(2)}_{ij}(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_{ij} G_0(\mathbf{p}) G_0(\mathbf{p}') \int d^3\mathbf{p}_1 / (2\pi)^3 u(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1) u(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}') G_0(\mathbf{p}_1) \exp[-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)\mathbf{r}_i - i(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}')\mathbf{r}_j]$$

В случае $i=j$ соответствующее усреднение проводится с помощью выражения (16.22):

$$\sum_i G^{(2)}_{ii}(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') = n(2\pi)^3 G_0^2(\varepsilon, \mathbf{p}) \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \int d^3\mathbf{p}_1 / (2\pi)^3 G_0(\varepsilon, \mathbf{p}_1) |u(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)|^2. \quad (16.24)$$

При разных рассеивателях аналог выражения (16.22) выглядит так:

$$\langle \exp[-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)\mathbf{r}_i - i(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}')\mathbf{r}_j] \rangle = (2\pi)^6 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1) \delta(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}'). \quad (16.25)$$

Поэтому для $i \neq j$ имеем:

$$\sum_{ij} \langle G^{(2)}_{ij}(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') \rangle = n^2 u_0^2 G_0^3(\varepsilon, \mathbf{p}) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \quad (16.26)$$

Если теперь в каждом порядке теории возмущений выделить процессы в которых на каждой примеси электрон рассеивается один или два раза, усреднить по беспорядку соответствующие члены в функции Грина и просуммировать, то мы придем к уравнению вида, изображенного на рис.49, которое в аналитическом виде запишется как

$$\langle G(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') [G_0^{-1}(\varepsilon, \mathbf{p}) - \langle \Sigma \rangle]^{-1}. \quad (16.27)$$

Из рассмотренных членов только (16.24) дает вклад в мнимую часть $\langle \Sigma \rangle$. Это- второй член борновского приближения для амплитуды рассеяния вперед, совпадающий с точностью до коэффициента с полным сечением рассеяния.

Задача: Найти функцию Грина для случая случайно распределенных δ -образных примесей.

Решение: В рассмотренном выше приближении

$$\int d^3\mathbf{p}_1 / (2\pi)^3 G_0(\varepsilon, \mathbf{p}_1) |u(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1)|^2 = u_0^2 \int d^3\mathbf{p}_1 / (2\pi)^3 G_0(\varepsilon, \mathbf{p}_1) = 4\pi p_0^2 u_0^2 / (2\pi)^3 \int d\zeta [\varepsilon - \zeta + i0 \operatorname{sign}(\varepsilon)]^{-1} = 4\pi p_0 u_0^2 / (2\pi)^3 m(-i\pi) \operatorname{sign}(\varepsilon).$$

Введя частоту рассеяния как $\tau^{-1} = m p_0 n \pi^{-1} [\int d^3\mathbf{r} u(\mathbf{r})]^2$, получим

$$\langle G(\varepsilon, \mathbf{p}, \mathbf{p}') \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') [\varepsilon - p^2 / 2m + \mu^* + (i/2\tau) \operatorname{sign}(\varepsilon)]^{-1}.$$

16.4 Особая роль диаграмм без самопересечений.

Ранее мы учитывали при суммировании только диаграммы без самопересечений. Теперь пришла пора убедиться, что подобное приближение правильно. Чтобы это сделать, рассмотрим два графика, изображенных на рис.89 и дающих поправки к собственно энергетической функции.

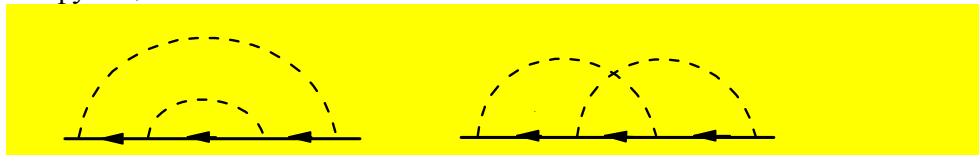


Рис.89.

Эти графики дают поправку к собственно энергетической функции во втором порядке и определяют низший порядок рассеяния на примеси. Перерисуем эти графики в координатном представлении.

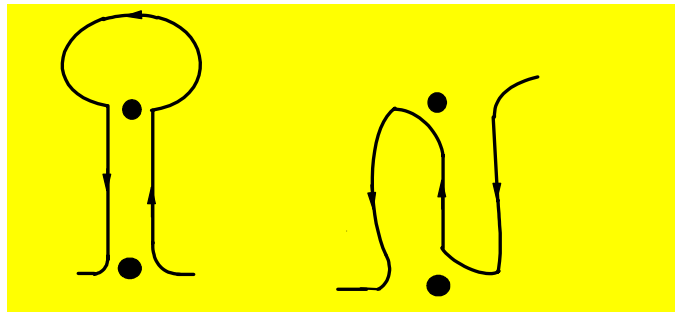


Рис. 90.

Разница между этими диаграммами на рис. 90 видна сразу: в первом случае путь между рассеивателями проходится два раза и электрон возвращается в исходную точку.

XVII. Жидкость Томонага-Латгинжера.

*Послушайте!
Ведь, если звезды
зажигают –
значит – это кому-нибудь нужно?
Значит – это необходимо,
чтобы каждый вечер
над крышами
загорелась хоть одна звезда?!
В. Маяковский (1914)*

17.1 Проблемы с ферми-жидкостным описанием в одномерном случае.

В этой главе мы рассмотрим свойства одномерных систем, составленных из взаимодействующих ферми-частиц. На практике такая система может быть реализована электронами в углеродных нанотрубках или специально приготовленных техникой нанопроцессинга одномерных проводниках. Точного решения задачи для одномерной системы взаимодействующих фермионов не существует. В этом смысле одномерные системы ничем не выделены, однако в одномерном случае могут быть сформулированы решаемые модельные задачи, которые и будут изложены ниже. Сразу же отметим, что получаемые на модельных задачах решения были неоднократно проверены численными экспериментами (например, методом Монте Карло) и сомнений в том, что модели адекватно отражают реальную ситуацию в настоящее время нет.

Чтобы осознать суть проблемы, существующей в одномерном случае, попробуем создать в нашей системе пару частица – пустое место с малым импульсом. Для начала полностью пренебрежем взаимодействием. Поскольку ферми-поверхность в одномерном случае выродилась в две точки ($+p_F, -p_F$), то единственной возможностью является увеличение модуля импульса исходного фермиона так, что он переместится в состояние над одной из ферми-точек (см рис. ...). На не вполне адекватном ситуации, зато наглядном квазиклассическом языке, можно сказать, что фермион увеличил свою энергию и импульс не смещаясь в пространстве. Другими словами, фермион и пустое место из рожденной пары изначально пространственно совпадают. В двумерных и трехмерных системах импульсы фермиона и пустого места не обязаны совпадать по направлению, поэтому рожденная пара быстро разбегается в пространстве. В одномерном случае, при изображенном на рис. возбуждении, разбегание будет определяться только разностью групповых скоростей начального и конечного состояний электрона. При линейном законе дисперсии вблизи p_F (что заведомо является хорошим приближением при малом импульсе пары), скорости совпадут и, следовательно, разбегания вообще не будет..

Вспомним теперь условия существования квазичастичных возбуждений (11.15) и (11.16), которые требуют, чтобы число квазичастиц n было существенно меньше, чем число исходных частиц N .

$$n \ll N. \quad (17.1)$$

Условие (17.1) можно переформулировать следующим образом: для введения квазичастиц необходимо, чтобы среднее расстояние между квазичастицами существенно превышало среднее расстояние между исходными частицами. В одномерном случае для ферми частиц и дырок это условие не выполняется.

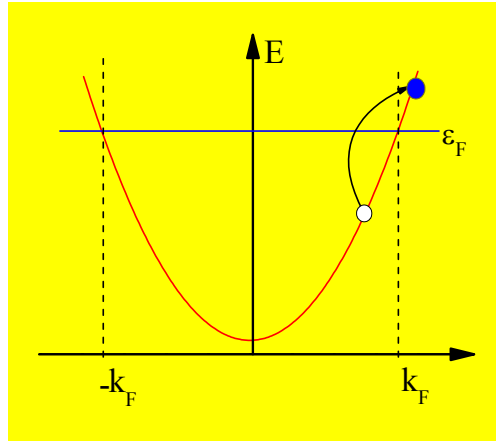


Рис.

Поэтому слаботухающие фермиевские квазичастицы в одномерном случае ввести невозможно даже при слабом взаимодействии. В одномерном случае рождаемые частицей виртуальные пары оказываются сильно взаимодействующими.

На языке исходных частиц этот факт проявляется в том, что в функции распределения исчезает скачок на фермиевском импульсе и исчезает само понятие фермиевской поверхности (см. рис.). Тем не менее, при слабом взаимодействии все состояния, соответствующие малым импульсам частиц, будут заполнены, а все состояния с достаточно большими импульсами окажутся пустыми. Функция распределения исходных частиц при нулевой температуре будет похожа на функцию распределения для невзаимодействующего газа при конечной температуре. Отсюда ясно, что все далее обсуждаемые свойства

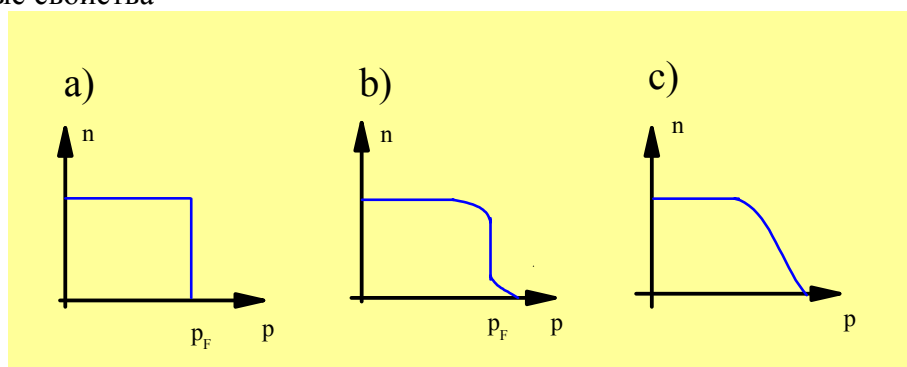


Рис. Функция распределения исходных частиц при нулевой температуре: а) газ невзаимодействующих фермионов, б) ферми-жидкость, с) Латтинжеровская жидкость

одномерных систем будут ярко проявляться только ниже некоторой, определяемой взаимодействием температуры.

Неразлучность переноса малый суммарный импульс фермиона и дырки наводит на мысль о возможности описания возбуждений в одномерной ферми- системе как бозевских частиц. Ситуация сильно напоминает экситонные возбуждения, с той лишь разницей, что связаны электрон и дырка за счет кинематики, а не за счет взаимодействия.

Эта идея впервые была использована Томонага, модель которого мы и обсудим в следующем параграфе.

В одномерной металлической системе корреляции в движении электронов сильны даже при слабом взаимодействии. Такие системы называют обычно латтинжеровской жидкостью. По определению, латтинжеровская жидкость есть не что иное как одномерный парамагнитный металл, в котором отсутствуют ландауовские одночастичные возбуждения. Отсутствие одночастичных возбуждений невольно порождает вопрос о возможности переноса тока. Этот вопрос ниже будет обсужден на примере хиральной жидкости Латтинжера.

17.2 Модель Томонага.

Прежде всего запишем гамильтониан взаимодействующего одномерного фермионного газа так, как это было сделано Томонага []:

$$H = v_F \sum_{k,\sigma} |k| c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + 1/(2L) \sum_k V_k \rho(k) \rho(-k);$$

$$\rho(k) = \sum_{p,\sigma} c_{p-k/2,\sigma}^+ c_{p+k/2,\sigma}. \quad (17.1)$$

Здесь $\rho(k)$ оператор плотности электронно-дырочных пар с импульсом k , а L – длина системы, V_k – Фурье компонента потенциала взаимодействия. В выражении (17.1) уже начато построение модели, поскольку реальный оператор кинетической энергии заменен модельным. Что касается части гамильтониана, описывающей взаимодействие, то она имеет обычный вид. Форма модельной кинетической энергии показана на рис. .

Знание гамильтониана само по себе еще не позволяет судить о спектре возбуждений. Нам предстоит либо решить уравнение Шредингера либо, точно или приближенно, привести гамильтониан к виду, решение для которого известно.

Попытаемся заменить фермиевские операторы в (17.1) на операторы рождения и уничтожения бозонов. Исходные операторы $\rho(k)$ не удовлетворяют необходимым для бозевских операторов соотношениям коммутации. Следуя Томонага, разделим операторы плотности пар на два:

$$\rho_1(k) = \sum_{p>0,\sigma} c_{p-k/2,\sigma}^+ c_{p+k/2,\sigma}; \quad \rho_2(k) = \sum_{p<0,\sigma} c_{p-k/2,\sigma}^+ c_{p+k/2,\sigma}; \quad \rho(k) = \rho_1(k) + \rho_2(k). \quad (17.2)$$

Каждый из вновь введенных операторов $\rho_1(k)$ и $\rho_2(k)$ не коммутирует с тем же оператором для $k=-k$, что вселяет надежду на возможность построения на базе каждого из $\rho_1(k)$; $\rho_2(k)$ бозевских операторов. К сожалению, коммутационные соотношения оказываются похожими на необходимые для бозе-частиц, но не точно требуемыми (см. задачу в конце этого параграфа). Тем не менее, Томонага заменил в (17.1) операторы $\rho_i(k)$ на точные бозевские обсуждаемым ниже способом. Эта замена является основным приближением модели Томонага.

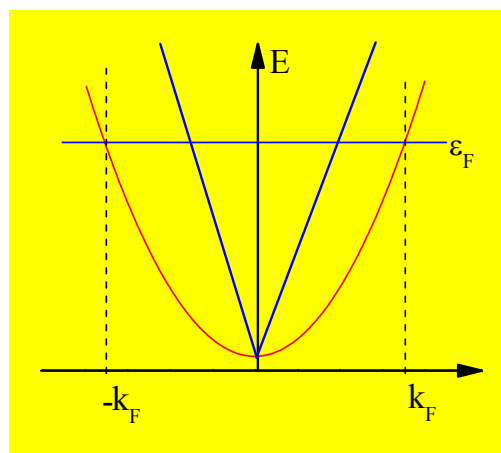


Рис. . Спектр невзаимодействующих частиц в модели Томонага показан прямыми синими линиями.

Заменим операторы $\rho_1(k)$ и $\rho_2(k)$ на бозевские f и f^+ по следующим правилам:

$$\begin{aligned}\rho_1(k) &= (kL/\pi)^{1/2} f_k^- ; \\ \rho_1(-k) &= (kL/\pi)^{1/2} f_k^+ ; \\ \rho_2(k) &= (kL/\pi)^{1/2} f_{-k}^+ ; \\ \rho_2(-k) &= (kL/\pi)^{1/2} f_{-k}^- ; \quad [f_k, f_{k'}^+] = \delta_{kk'}\end{aligned}\quad (17.3)$$

Второй член в (17.1) легко переписывается в новых операторах

$$1/(2L) \sum_k V_k \rho(k) \rho(-k) = \sum_k |k| V_k (2\pi)^{-1} (f_k + f_{-k}^+) (f_k^+ + f_{-k}). \quad (17.4)$$

Хуже дело обстоит с кинетической энергией. Ее тоже нужно представить через произведение операторов f , однако точно этого сделать нельзя. Попробуем приблизить оператор кинетической энергии, пользуясь тем соображением, что спектр возбуждений системы полностью определяется коммутационными соотношениями. Подберем произведение бозевских операторов так, чтобы приблизить коммутационные соотношения первого члена в (17.1). Соответствующие ответы для кинетической энергии H_0 и полного гамильтониана H выглядят следующим образом:

$$H_0 = \sum_k \omega_k f_k^+ f_k; \quad \omega_k = v_F |k|.$$

$$H = \sum_k \omega_k f_k^+ f_k + \sum_k |k| V_k (2\pi)^{-1} (f_k + f_{-k}^+) (f_k^+ + f_{-k}). \quad (17.5)$$

Решение (17.5) проще всего найти с помощью поворота в операторном пространстве, аналогичного тому, что мы производили в параграфе 4.2. Введем новые операторы, отвечающие обобщенной коллективной координате и импульсу бозевских возбуждений.

$$\begin{aligned}Q_k &= (2/\omega_k)^{-1/2} (f_k + f_{-k}^+), \\ P_k &= i(2/\omega_k)^{-1/2} (f_k^+ - f_{-k}), \quad [Q_k, P_{k'}] = i\delta_{kk'}\end{aligned}\quad (17.6)$$

Гамильтониан приобретает вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \{P_k P_{-k} + Q_k Q_{-k} (\omega_k^2 + 4\omega_k |k| V_k / 2\pi)\}, \quad (17.7)$$

а спектр возбуждений определяется соотношением

$$E_k = (\omega_k^2 + 4\omega_k |k| V_k / 2\pi)^{1/2} = |k| \{v_F^2 + 2/\pi V_k v_F\}^{1/2}. \quad (17.8)$$

Поскольку потенциал взаимодействия предполагается положительным (электроны отталкиваются), то скорость коллективных возбуждений в модели Томонага превышает фермиевскую для исходных частиц. Рассмотренные нами возбуждения не захватывают спиновых степеней свободы и соответствуют одномерным плазмонам при малых волновых векторах и электронно-дырочным возбуждениям при больших $|k|$. Другой ветвью возбуждений в модели Томонага будут спиновые волны, закон дисперсии которых не отличается от случая свободных частиц.

Задача: В модели Томонага вычислить коммутатор $[\rho_1(k), \rho_1(k')]$.

$$\begin{aligned}\text{Решение: } [\rho_1(k), \rho_1(k')] &= \sum_{p, p' > 0; s, s'} [c_{p-k/2, s}^+ c_{p+k/2, s} c_{p'-k'/2, s} c_{p'+k'/2, s'}] = \\ &= \sum_{p > 0; s} \{c_{p-k/2, s}^+ c_{p+k'/2, s} \Theta(p+k/2+k'/2) - c_{p-k'/2, s}^+ c_{p+k/2, s} \Theta(p-k/2-k'/2)\}.\end{aligned}$$

Например:

$$[\rho_1(k), \rho_1(-k)] = \sum_{s, p > 0} \{n_{p-k/2, s} - n_{p+k/2, s}\} = \sum_{s, -k/2 < p < k/2} n_{p, s}$$

Если для оценки заменить $n_{p, s}$ его средним значением по основному состоянию не взаимодействующих частиц, то получим

$$\sum_{s, -k/2 < p < k/2} n_{p, s} = kL/\pi \text{ при } k < 2k_F \text{ и } \sum_{s, -k/2 < p < k/2} n_{p, s} = k_F L/\pi \text{ при } k > 2k_F$$

17.3 Модель Латтинжера.

Модель Латтинжера [] является модификацией модели Томонага, обладающей собственными достоинствами и недостатками. К числу достоинств относится возможность отыскания точного решения для этой модели. Чтобы понять недостатки, нужно модель детализировать.

Латтинжер продлил прямые линии спектра на рис. в область отрицательных энергий до бесконечности так, как это показано на рис. , после чего поделил фермионы

на два сорта - «правые» (обозначенные цифрой 1 на рисунке) и «левые» (2- на рисунке). Соответственно, антикоммутаторы исходных частиц обладают свойством

$$\{c_{i,k',s'}, c_{j,k,s}^+\} = \delta_{ij} \delta_{s's} \delta_{k'k} \quad (17.9)$$

На этом месте уже можно назвать недостатки модели: нефизическое разделение фермионов на два сорта (естественно, с антикоммутаторами, не совпадающими с исходными) и столь же нефизическое продление спектра до минус бесконечности (предполагающее существование бесконечного резервуара частиц у каждого из фермионных сортов).

Теперь пришло время воспользоваться достоинствами модели. Аналогично тому, как это было сделано в модели Томонага, введем операторы плотности пар:

$$\begin{aligned} \rho_i(k) &= \sum_{\text{все } p,s} c_{i,p+k,s}^+ c_{i,p,s}; \\ \rho_i(-k) &= \sum_{\text{все } p,s} c_{i,p,s} c_{i,p+k,s}^+ = \rho_i^+(k); \\ \sigma_i(k) &= \sum_{\text{все } p,s} s c_{i,p+k,s}^+ c_{i,p,s}; \\ \sigma_i(-k) &= \sum_{\text{все } p,s} s c_{i,p,s} c_{i,p+k,s}^+ = \sigma_i^+(k). \end{aligned} \quad (17.10)$$

Введенные операторы точно и для всех k обладают коммутационными соотношениями, необходимыми для введения бозевских операторов.

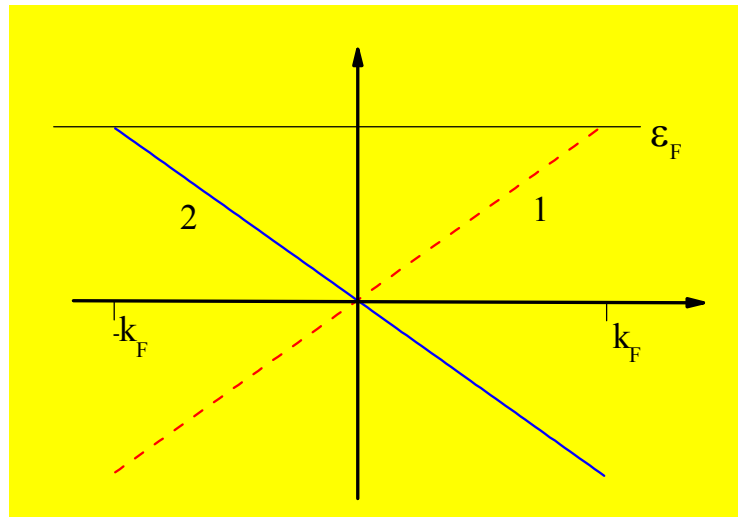


Рис. . Цветными линиями показан спектр невзаимодействующих частиц в модели Латтинжера. Предполагается наличие двух разных типов ферми-частиц : правых (1) и левых (2). Каждая из прямых протягивается вниз до бесконечности.

$$\begin{aligned} [\rho_1(-k), \rho_1(k')] &= \delta_{k,k'} (kL/\pi) \\ [\rho_2(k), \rho_2(-k')] &= \delta_{k,k'} (kL/\pi) \\ [\rho_1(k), \rho_2(-k')] &= 0 \\ [\sigma_1(-k), \sigma_1(k')] &= \delta_{k,k'} (kL/\pi) \\ [\sigma_2(-k), \sigma_2(k')] &= \delta_{k,k'} (kL/\pi) \\ [\sigma_1(k), \sigma_2(k')] &= 0 \\ [\sigma_i(k), \rho_j(k')] &= 0. \end{aligned} \quad (17.11)$$

Подчеркнем, что соотношения (17.11) справедливы точно только для бесконечного числа фермионов двух сортов, т.е. существенно используют приближения модели Латтинжера.

Кинетическая энергия в модели Латтинжера записывается как

$$H_0 = v_F \sum_{k,s} k (c_{1,k,s}^+ c_{1,k,s} - c_{2,k,s}^+ c_{2,k,s}) \quad (17.12)$$

Этот оператор имеет точные коммутационные соотношения для $p > 0$:

$$\begin{aligned} [H_0, \rho_1(p)] &= v_F p \rho_1(p); & [H_0, \rho_2(p)] &= -v_F p \rho_2(p); \\ [H_0, \sigma_1(p)] &= v_F p \sigma_1(p); & [H_0, \sigma_2(p)] &= -v_F p \sigma_2(p). \end{aligned} \quad (17.13)$$

что позволяет переписать (17.12) через операторы рождения электронно дырочных пар и спинов

$$H_0 = (\pi v_F / L \sum_{p>0} [\rho_1(p)\rho_1(-p) + \rho_2(-p)\rho_2(p) + \sigma_1(p)\sigma_1(-p) + \sigma_2(-p)\sigma_2(p)]). \quad (17.14)$$

Как обычно, потенциал взаимодействия может быть записан в виде произведения четырех одноэлектронных операторов или двух операторов плотности

$$\begin{aligned} V_1 &= (2L)^{-1} \sum_{p>0} V_{1p} [\rho_1(p)\rho_1(-p) + \rho_2(-p)\rho_2(p)], \\ V_2 &= (2L)^{-1} \sum_{p>0} V_{2p} \rho_1(p)\rho_2(-p). \end{aligned} \quad (17.15)$$

Оператор ρ_1 в (17.14) и (17.15) уничтожает частицу в состоянии k и рождает частицу в $p+k$. Т. е., если $k < k_F$, а $p+k > k_F$, этот оператор рождает пару и с точностью до множителя совпадает с бозонным оператором. Аналогично обстоит дело и с оператором ρ_2 . Процедура бозонизации сводится к введению нормировочных множителей и переобозначению. Дальнейший путь решения может повторять, например, путь предыдущего параграфа с боголюбковским поворотом.

В качестве примера приведем спектр бозевских возбуждений для системы одномерных бесспиновых (полностью поляризованных по спину) фермионов:

$$E(p) = \{ [p v_F + (2\pi)^{-1} p V_{1p}]^2 - [(2\pi)^{-1} p V_{2p}]^2 \}^{1/2}. \quad (17.16)$$

Как мы помним, квазичастицам-бозонам соответствуют элементарные возбуждения соответствующих осцилляторов. С помощью процедуры бозонизации можно построить отдельные осцилляторы для описания движения заряда в одномерных взаимодействующих системах и для описания поведения спина. Соответствующие возбуждения называют “холонами” (для зарядов) и “спинонами”, соответственно. Возбуждения каждого из двух типов имеют спектр $\omega_v = v_v |q|$ (где индекс может означать заряд или спин). В общем случае скорости распространения холонов и спинов различны.

17.4. Хиральная Латтинжеровская жидкость.

Рассмотрим двумерную электронную систему, помещенную в нормальное квантующее магнитное поле и занимающую полосу $x_1 < x < x_2$, y . Начнем с газа невзаимодействующих двумерных электронов расположенного вдали от края. В калибровке Ландау

$\mathbf{A} = (0, B, 0)$, (где \mathbf{A} – вектор-потенциал) Каждый из электронов опишется уравнением Шредингера:

$$\begin{aligned} \left[(1/2m)(p_x^2 + (p_y + e/c B)^2) \right] f(x, y) &= (E - E_m) f(x, y). \\ f(x, y) &= \exp(ik_y y) \phi_n(x - x_0) \end{aligned} \quad (17.17)$$

Для простоты мы полностью забудем про спин и ограничимся нижней двумерной электронной подзоной $E_m = E_0 = 0$; $x_0 = k_y l^2$, где l – магнитная длина. Легко видеть, что в нашем случае уравнение, описывающее невзаимодействующий газ в потенциале $U(x)$, сводится к уравнению для одномерного движения в потенциальной яме

$$\left[-(\hbar^2/2m) d^2/dx^2 + m\omega_c^2 (x - x_0)^2/2 + U(x) \right] \phi_n = E_n \phi_n \quad (17.18)$$

$\omega_c = (eB/mc)$ – циклотронная частота. Решения уравнение (17.18) соответствуют набору дискретных уровней, зависящих от положения «ведущего центра» электрона x_0 , как это показано на рис.

Все электроны физически находятся внутри полосы. Их волновые функции отличны от нуля также только внутри полосы, но ведущие центры могут находиться как внутри, так и вне полосы. Можно отметить места пересечения энергетических уровней с фермиевской энергией. На плоскости они изобразятся прямыми линиями, выходящими за пределы полосы в случае резкого края и остающимися внутри полосы при плавном краевом потенциале. Об этих линиях говорят как об изображениях краевых каналов.

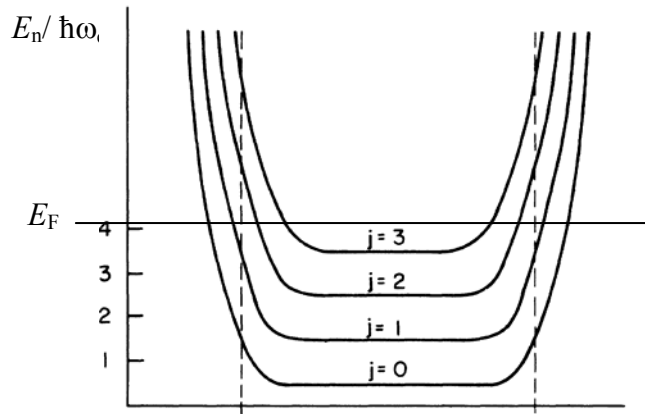


Рис. . Схематическое изображение энергетических уровней уравнения (17.18) для полоски шириной $(x_2 - x_1)$, ограниченной вертикальными стенками бесконечной высоты.

Краевые каналы играют важную роль в описании транспорта в целочисленном и дробном квантовом эффекте Холла. В случае плавного краевого потенциала его профиль в квантующем магнитном поле изменяется так, как это показано в правой части рис. ., и краевые каналы становятся физическими объектами, наблюдаемыми экспериментально.

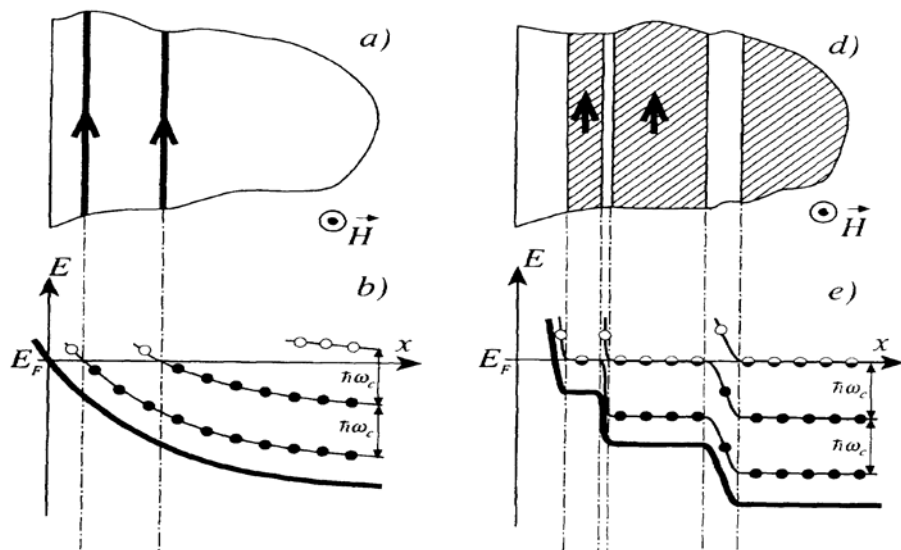


Рис. . Слева на рисунке показан спектр у края образца, в соответствии с (17.18). Справа реально ожидаемый спектр. Заштрихованы сжимаемые полосы.

Тем не менее, и при наличии плавного края, и в результате реконструкции краевого потенциала, показанного на рис. ., систематика состояний у невзаимодействующих электронов не изменяется: каждый из электронов является одномерной волной в направлении y и заполнены все k_y вплоть до фермиевского. Это именно те требования, которые были необходимы для использования модели Латтинжера для описания газа взаимодействующих фермионов.

В отличие от предыдущего параграфа, в квантующем магнитном поле исходно будут фермионы только одного сорта (в зависимости от направления магнитного поля только правые или только левые). Даже наличие бесконечного резервуара частиц в случае полуплоскости вполне осмысленно. Изменение описания фермионной системы ничего не

приносит в отсутствие взаимодействия (целочисленный квантовый эффект Холла, например), но может оказаться очень полезным, если взаимодействие между электронами необходимо учитывать (при дробном квантовом эффекте Холла). Часто электроны в дробном квантовом эффекте Холла описывают как хиральную (имеющую направление) латтинджеровскую жидкость.

Задача: Дать формальное определение резкого края и плавного краевого потенциала.

Мгновенно возникает несколько вопросов, первый из которых формулируется так: *какие бозевские зарядовые возбуждения играют роль холонов в дробном квантовом эффекте Холла?* Или, «какие волны могут распространяться по краю»? Ответ на этот вопрос очевиден – все возможные типы краевых магнитоплазмонов. {Для тех, кто совершенно незнаком со свойствами двумерной электронной жидкости в квантующем магнитном поле, поясним причину возникновения простейшего краевого магнитоплазмона. Пусть на краю нашей полуплоскости возникла избыточная плотность

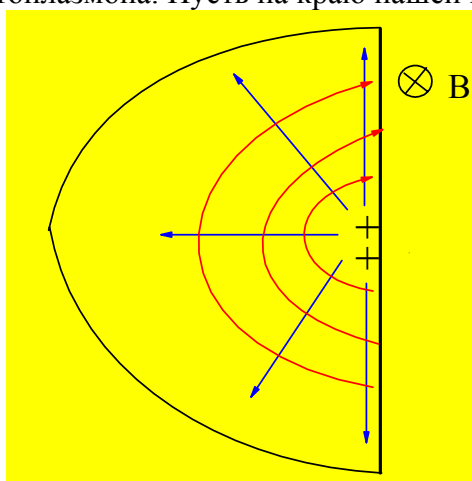


Рис. . Синие стрелки – электрическое поле зарядов. Красные – линии потока электронов к границе.

положительного заряда. Тогда, в условиях нулевой диагональной проводимости и ненулевой холловской, электроны потекут к границе по линиям, нормальным к исходным силовым, как это показано на рис. . Положительный заряд начнет перемещаться вдоль границы вниз со скоростью, пропорциональной σ_{xy} . При периодической модуляции заряда соответствующая волна на краю будет простейшим видом краевого магнитоплазмона.}

Следующим естественно возникающим вопросом является вопрос о транспортном токе. К краю образца не трудно приделать пару контактов и пропустить между ними ток. *Как будет переноситься ток в отсутствие одночастичных возбуждений?*

Хорошо известно, что в бездиссипативном режиме ток может переноситься основным состоянием. По отношению к целочисленному и дробному квантовому эффекту Холла возможность бездиссипативного переноса заряда под уровнем Ферми была продемонстрирована экспериментально в работе []. Аналогична ситуация и при переносе тока по краевым состояниям. Рассеяние назад в этом случае означает рассеяние на противоположный край образца, что при макроскопических размерах совершенно невозможно. Стало быть, ток протекает без диссипации и переносится модифицированным основным состоянием.

Не прозевайте. При двухконтактных измерениях сопротивление конечно, значит диссипация все же есть. Но происходит диссипация не в двумерной системе, а в контактах.

Самый важный вопрос для экспериментатора: *как можно проверить, что краевые состояния действительно представляют собой хиральную латтинджеровскую жидкость?* Для этого требуется реализовать туннелирование в край. Каждый из протуннелировавших электронов вносит вклад в несущее ток модифицированное

основное состояние и приводит к возбуждению потока краевых магнитоплазмонов, т.е. распадается на элементарные возбуждения латтинжеровской жидкости. Эти процессы могут быть зафиксированы по туннельным вольт-амперным характеристикам.

XVIII. Температурные функции Грина.

*И тут Степины мысли побежали
уже по двойному рельсовому пути,
но, как всегда бывает во время
катастрофы, в одну сторону и
вообще черт знает куда.*

М. Булгаков. Мастер и Маргарита.

18.1 Матрица плотности, флуктуации и постановка задачи.

Как известно, в общем случае для описания квантовомеханических свойств системы необходимо использовать матрицу плотности (см. Ландау и Лифшиц, Квантовая механика §14). Такой способ описания позволяет описывать системы, находящиеся в «смешанном состоянии», в котором никакое измерение и никакой набор измерений не приводят к однозначно предсказуемым результатам, а стало быть, исследуемая система испытывает флуктуации. Макроскопическая система оказывается в «смешанном состоянии», во-первых из-за конечности температуры, поскольку при конечной температуре наша система с определенной вероятностью может оказаться в возбужденных состояниях. Результатом конечности температуры являются тепловые флуктуации. Однако и при нулевой температуре «смешанное состояние» не исчезает. Дело в том, что чрезвычайная густота энергетических уровней макроскопической системы приводит к тому, что всякое взаимодействие нашей системы с окружением, каким бы оно не казалось слабым в остальных отношениях, смешивает состояния в некоторой малой области энергий. Кроме того, система когда-то была приготовлена (выделена), Как бы ни было велико время, прошедшее с момента приготовления. конечность этого времени приведет к «смешанности» состояния. Результатом этого типа смешивания являются квантовые флуктуации.(Более подробно рассуждения на эту тему приведены в §14 Квантовой механики.)

Для подсистемы некоторой замкнутой системы матрица плотности определяется как

$$\rho(x',x) = \int \Psi^*(x',q) \Psi(x,q) dq, \quad (18.1)$$

где x –соответствует совокупности координат подсистемы, q – оставшиеся координаты системы, $\Psi(x,q)$ –волновая функция замкнутой системы.

Среднее значение произвольной величины, описывающей подсистему, может быть найдено следующим образом

$$\langle s \rangle = \int \hat{s}[\rho(x',x)] dx. \quad (18.2)$$

В этом выражении сначала следует применить оператор \hat{s} , действующий на переменные x , к $\rho(x',x)$, затем положить $x'=x$ и проинтегрировать. Если ввести «стационарные» состояния нашей подсистемы, как состояния, получающиеся при полном пренебрежении взаимодействием подсистемы с окружением, то можно ввести собственные энергетические уровни подсистемы и соответствующие волновые функции. Удалить взаимодействие с окружением на этом этапе нам понадобилось только для получения удобного полного набора волновых функций. Уравнение (18.2) переписется в виде

$$\langle s \rangle = \sum_n \rho_{nn} s_{nn} / \sum_n \rho_{nn} = \sum_n w_{nn} s_{nn} = \text{Sp} (\hat{s} \hat{w}). \quad (18.3)$$

Здесь w_{nn} есть не что иное как все та же недиагональная матрица плотности в энергетическом представлении.

Если рассматривать статистически равновесное состояние, то можно показать, что матрица w_{nn} должна быть диагональна и ее диагональные элементы будут функциями энергии соответствующего состояния подсистемы ϵ_n (см. Ландау и Лифшиц, Статистическая физика §6). Так мы перешли от матрицы плотности к статистической матрице w_{nn} , описывающей большие канонические ансамбли, способные обмениваться частицами и энергией с резервуаром, т.е. с оставшейся частью нашей замкнутой системы. Специально отметим, что пока хоть один из w_{nn} при $n \neq 0$ имеет конечную величину состояние подсистемы остается смешанным и всякая измеряемая величина испытывает флуктуации. Именно так выглядит статистическая матрица любой нормальной подсистемы при произвольной температуре. В пределе высоких температур с хорошей точностью статистическая матрица подчиняется распределению Гиббса (см. Ландау и Лифшиц, Статистическая физика §28):

$$w_{nn} = A \exp(-\epsilon_n/kT), \quad (18.4)$$

в котором коэффициент A определяется условием нормировки $A=1/Z$, $Z = \sum_n \exp(-\epsilon_n/kT)$, где Z – статистическая сумма. В области рассматриваемых высоких температур флуктуации имеют в основном тепловое происхождение.

Наивная экстраполяция выражения (18.4) к нулевой температуре привела бы к заключению, что наша подсистема при нулевой температуре окажется в основном состоянии. Такое заключение абсолютно ошибочно: даже при нулевой температуре незамкнутая подсистема остается в «смешанном состоянии» (о причинах такого поведения см. Ландау и Лифшиц, Статистическая физика §5). Это означает, что по мере понижения температуры каждый из w_{nn} ($n \neq 0$) не стремится экспоненциально в нуль, а приближается к константе от температуры не зависящей. Происходит переход от тепловых флуктуаций к квантовым.

Строго говоря, разделение флуктуаций на тепловые и квантовые при конечной температуре весьма условно, тем не менее, такое разделение оказывается полезным в окрестности точки квантового фазового перехода. Напомним, что такой переход происходит при низкой (в пределе стремящейся к нулю) температуре в подсистеме контролируемой каким-либо внешним параметром: концентрацией электронов, магнитным полем и т.д. Квантовые свойства подсистемы проявляются в том, что в одной области изменения контролирующего параметра (например, $K < K_0$) в системе может быть введен параметр порядка, обращающийся в нуль при $K=K_0$ и отсутствующий при $K > K_0$. Флуктуации оказываются пространственно скоррелированными на длине ξ , расходящейся по мере приближения к точке K_0 . Каждому значению ξ соответствует некоторая энергия, вообще говоря, уменьшающаяся по мере роста ξ . Приравняв эту

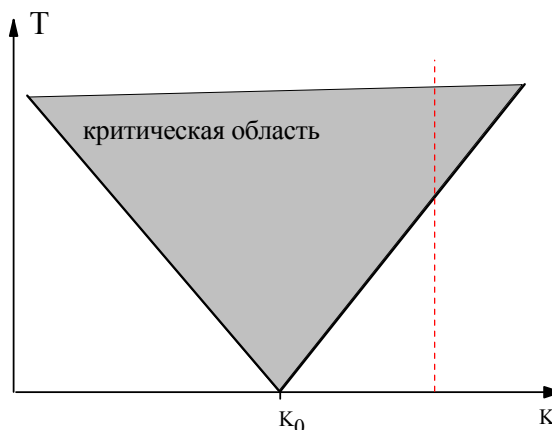


Рис.

энергию температуре kT , мы получим на плоскости область, называемую критической и сходящуюся в точку при $K=K_0$ (рис. .1). В качестве примера рассмотрим, картину флуктуаций при уменьшении температуры вдоль красной пунктирной по вертикальной линии, отмеченной на рис. . . Внутри критической области, закрашенной серым, на больших масштабах и, соответственно, на малых энергиях преобладают тепловые флуктуации. Ими определяется длина сбоя фазы l_ϕ , которая меньше, чем ξ в этой области и сравнивается с ξ на границе. Дальнейшее понижение температуры приводит к тому, что l_ϕ становится больше ξ , и на интересующем нас масштабе ξ основными оказываются квантовые флуктуации. Внутри критической области транспортные свойства являются функцией параметра (ξ/l_ϕ) и, следовательно, обладают определенной универсальностью.

Ниже нам предстоит рассмотреть возбужденные состояния многофермионной системы и процедуру вычисления энергии ее основного состояния при конечной температуре. Мы будем рассматривать низкоэнергетические возбужденные состояния макроскопических ферми систем, в которых нетепловой «смешанностью» состояния можно пренебречь.

18.2 Термодинамическая (мацубаровская) функция Грина.

В соответствии с определением (11.3) одночастичная функция Грина при нулевой температуре есть не что иное как среднее по основному состоянию системы взаимодействующих фермионов от оператора $T[c_{k_2}(t_2)c_{k_1}^+(t_1)]$. Чтобы получить одночастичную функцию Грина при конечной температуре нужно тот же оператор усреднить по «смешанному» состоянию», т.е. по состояниям ансамбля систем соответствующему выражению (18.3), где под \hat{w} мы теперь имеем в виду статистический оператор, вид которого мы еще уточним:

$$G^T(k, t_2-t_1) = -i \langle T[c_k(t_2)c_k^+(t_1)] \rangle = -i \text{Sp}\{T[c_k(t_2)c_k^+(t_1)] \hat{w}\} / \text{Sp}\{\hat{w}\}, \quad (18.5)$$

где операция взятия следа определена как

$$\text{Sp} = \sum_n \langle n | \dots | n \rangle.$$

Выражение (18.5) дает ответ на вопрос, что нам нужно найти, чтобы определить, например, изменение спектра возбуждений с температурой, но не несет информации о том, как это можно сделать. Оптимально было бы найти способ разложения (18.5) в диаграммный ряд. Однако, взаимодействие между частицами и другие типы возмущения попадают в (18.5) двумя разными способами: во-первых, через временную эволюцию (с которой мы уже научились обращаться), а во вторых, через эволюцию по температуре.

Диаграммный ряд на базе смешанного состояния можно построить для иной функции Грина, называемой термодинамической или мацубаровской. Прежде чем давать ее определение обратимся вновь к статистическому оператору. Для системы, способной обмениваться энергией и частицами с резервуаром, его удобно определить как (см. также (11.27):

$$\hat{w} = \exp[-\beta(H')] = \exp[-\beta(H - \mu N)], \quad \text{где } \beta = 1/kT. \quad (18.6)$$

Дифференцируя (18.6), получим уравнение, известное как уравнение Блоха:

$$\partial \hat{w} / \partial \beta = H' \hat{w}. \quad (18.7)$$

Это уравнение ничем не отличается от уравнения Шредингера со временем,

$$\partial \psi / \partial t = -i H \psi(t), \quad (18.8)$$

следовательно, для него можно ввести функцию Грина и в системе с взаимодействием и/или находящейся во внешнем поле искать эту функцию Грина в виде диаграммного разложения.

Пользуясь аналогией между (18.7) и (18.8), эволюцию системы по обратной температуре можно представить как эволюцию по мнимому времени и определить мацубаровскую функцию Грина как

$$G(k, \tau_2 - \tau_1) = - \langle T[c_k(\tau_2)c_k^+(\tau_1)] \rangle = - \text{Sp}[\exp(-\beta(H - \mu N - \Omega)) \{ T \exp(\tau_2(H - \mu N)) c_k \exp(-(H - \mu N)(\tau_2 - \tau_1)) c_k^+ \exp(-\tau_1(H - \mu N)) \}], \quad (18.8)$$

здесь τ - действительная величина, причем $0 < \tau_1, \tau_2 < \beta$; угловые скобки означают усреднение по состояниям ансамбля систем (18.5). Зависимость произвольного оператора от мацубаровского времени τ вводится обычным способом:

$$\hat{s}(\tau) = \exp[\tau(H - \mu N)] \hat{s} \exp[-\tau(H - \mu N)], \quad (18.9)$$

$\exp(-\beta\Omega) = \text{Sp}(\exp(-\beta(H - \mu N)))$ есть не что иное как нормировочный коэффициент. Разность мацубаровских времен $(\tau_2 - \tau_1)$ изменяется в интервале от $-\beta$ до β .

Диаграммный ряд для термодинамической функции Грина строится подобно ряду для обычной временной функции Грина. Зная функцию $G(k, \tau_2 - \tau_1)$ можно построить $G^T(k, t_2 - t_1)$, сделав замену $\tau \rightarrow -it$. Поскольку τ является величиной действительной, то время в построенной так функции G^T окажется мнимым, в связи с чем мацубаровскую функцию Грина называют функцией Грина с мнимым временем.

Повторимся еще раз, Если при рассмотрении системы при нулевой температуре, у нас была возможность ввести виртуальные переходы только в реальном времени, то при конечной температуре возможно рассмотреть виртуальные переходы и по мнимому времени, что и приводит к построению мацубаровской функции Грина.

Обратим внимание на то, что введение дополнительной координаты для эволюции системы активно использовалось для построения представлений о квантовых фазовых переходах. Действительно, непрерывный переход квантовой системы в d измерениях должен быть подобен непрерывному фазовому переходу $d+1$ мерной классической системы благодаря наличию в квантовой системе новой степени свободы – мнимого времени.

На базе (18.8) можно построить функцию Грина, определенную на всей оси τ . С этой целью периодически продолжим (18.8) на всю ось:

$$G(k, \omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} \exp(i\omega_n \tau) G(k, \tau) d\tau, \\ G^{\text{период}}(k, \tau) = \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega_n \tau) G(k, \omega_n). \quad (18.10)$$

Здесь $\omega_n = \pi n/\beta$ так называемые мацубаровские частоты. (В дальнейшем мы будем опускать индекс «период», имея в виду, что мы постоянно работаем с периодически продолженной функцией.) Для фермиевских систем все n нечетны (см. задачу). Фермиевскую функцию распределения можно разложить в ряд по мацубаровским частотам, поскольку функция распределения, в комплексной плотности имеет полюса на мнимой оси при мацубаровских частотах.

$$n_F(\xi_p) = n_F(\epsilon_p - \mu) = (\exp(\beta \xi_p + 1))^{-1} = \frac{1}{2} + \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} [i\omega_n - \xi_p]^{-1}, \quad (18.11)$$

причем каждый из членов суммы по структуре напоминает функцию Грина свободной частицы.

Задача: Показать, что мацубаровские частоты для ферми систем заданы выражением $\omega_n = \pi(2n+1)/\beta$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.

Решение: Стартуем с выражения (18.8), для определенности считая $\tau_2 < \tau_1$:

$$- \langle T[c_k(\tau_2)c_k^+(\tau_1)] \rangle = \text{Sp}[\exp(-\beta(H - \mu N - \Omega)) \{ c_k^+(\tau_1) c_k(\tau_2) \}]$$

Теперь добавим к τ_2 величину β . В результате $\tau_2 + \beta > \tau_1$.

$$- \langle T[c_k(\tau_2)c_k^+(\tau_1)] \rangle = - Sp[exp(-\beta(H-\mu N-\Omega))\{c_k(\tau_2+\beta)c_k^+(\tau_1)\}] = - Sp[exp(-\beta(H-\mu N-\Omega))\{exp(-\beta(H-\mu N))c_k(\tau_2+\beta)exp(\beta(H-\mu N))c_k^+(\tau_1)\}] = - Sp[exp(-\beta(H-\mu N-\Omega))\{c_k(\tau_2+\beta)c_k^+(\tau_1)\}].$$

След матрицы, составленный из произведения двух операторов не зависит от порядка следования операторов (легко убедиться непосредственно в матричном виде), поэтому $G^{\text{период}}(k, \tau) = -G^{\text{период}}(k, \tau+\beta)$. Подставив это выражение в (18.10), получим требуемое утверждение.

18.3 Термодинамическая функция Грина свободной частицы.

Вспомним, как выглядела функция Грина свободной частицы при $T=0$ (см. (10.8) и (10.25):

$$G_0(\mathbf{k}, t_2-t_1) = -i[\theta_{t_2-t_1}\theta_{k-k_F} - \theta_{t_1-t_2}\theta_{k_F-k}] \exp(-i(\epsilon_k - \mu)(t_2-t_1)). \quad (18.12)$$

Построим теперь термодинамическую функцию Грина для свободной частицы и сравним ее с выражением (18.12). Будем считать для начала, что $\tau_1 = 0$, $\tau_2 = \tau$. Нам предстоит вычислить следующую величину

$$\sum_I \langle \Phi_I | c_k(\tau) c_k^+ | \Phi_I \rangle \langle \Phi_I | \hat{w} | \Phi_I \rangle / \sum_I \langle \Phi_I | \hat{w} | \Phi_I \rangle, \quad (18.13)$$

где Φ_I собственные функции гамильтониана системы невзаимодействующих фермионов и учтено, что у \hat{w} имеются в этом базисе только диагональные матричные элементы. Рассмотрим первый матричный элемент под знаком суммы в (18.13). Он содержит операторы рождения и уничтожения в различные времена τ . Попробуем избавиться от разных времен. Применение оператора c_k^+ к вектору $|\Phi_I\rangle$ будет давать ненулевой результат только, если исходно k состояние было пустым.

$$c_k^+ | \Phi_I \rangle = \gamma | \Phi_I^k \rangle. \quad (18.14)$$

Здесь вектор $|\Phi_I^k\rangle$ описывает состояние $|\Phi_I\rangle$ с заполненным k состоянием, т.е. состояние из исходного числа частиц плюс еще одна частица. К нему, согласно (18.8) нам предстоит применить оператор $c_k \exp(-(H-\mu N)\tau)$, где оператор N пересчитывает число частиц, в результате чего получим

$$\eta \exp(-[\sum_p \epsilon_p - \mu(n_I+1)]\tau) | \Phi_I \rangle. \quad (18.15)$$

Здесь суммирование проводится по всем состояниям, включая k состояние. Осталось, во первых, применить к выражению (18.15) оператор $\exp(\tau(H-\mu N))$ и получить в результате всех этих процедур

$$\eta \exp(-[\epsilon_k - \mu]\tau) | \Phi_I \rangle. \quad (18.16)$$

Во-вторых, пройти цепочку (18.16) – (18.13) в обратном направлении, используя не зависящие от времени операторы рождения и уничтожения. Так (18.16) представляется в виде

$$\exp(-[\epsilon_k - \mu]\tau) \gamma c_k | \Phi_I^k \rangle = \exp(-[\epsilon_k - \mu]\tau) c_k c_k^+ | \Phi_I \rangle. \quad (18.17)$$

Соответственно, запаздывающая часть термодинамической свободной функции Грина запишется в виде:

$$G^+(k, \tau_2-\tau_1) = -\theta_{\tau_2-\tau_1} f_k^+ \exp(-[\epsilon_k - \mu][\tau_2-\tau_1]), \quad (18.18)$$

где $f_k^+ = \sum_I \langle \Phi_I | c_k c_k^+ | \Phi_I \rangle \langle \Phi_I | \hat{w} | \Phi_I \rangle / \sum_I \langle \Phi_I | \hat{w} | \Phi_I \rangle$. Аналогично вычисляется $G^-(k, \tau_2-\tau_1)$. Полная термодинамическая функция Грина приобретает вид

$$G(k, \tau_2-\tau_1) = -\{\theta_{\tau_2-\tau_1} f_k^+ - \theta_{\tau_1-\tau_2} f_k^-\} \exp(-[\epsilon_k - \mu][\tau_2-\tau_1]), \quad (18.19)$$

подобный (18.12), с той лишь разницей, что θ_{k-k_F} заменена на f_k^+ , а θ_{k_F-k} заменена на f_k^- . Здесь $f_k^- = \sum_I \langle \Phi_I | c_k^+ c_k | \Phi_I \rangle \langle \Phi_I | \hat{w} | \Phi_I \rangle / \sum_I \langle \Phi_I | \hat{w} | \Phi_I \rangle$. По определению, f_k^- есть не что иное, как среднее число частиц в состоянии k , т.е. хорошо нам знакомая фермиевская функция распределения (доказательство этого утверждения приведено ниже в задаче):

$$f_k^- = \langle n_k \rangle = \{1 + \exp[\beta(\epsilon_k - \mu)]\}^{-1}. \quad (18.20)$$

Соответственно, $f_k^+ = 1 - f_k^- = 1 - \langle n_k \rangle = \{1 + \exp[-\beta(\epsilon_k - \mu)]\}^{-1}$. (18.21)

Там, где в функции Грина при нулевой температуре стояли θ функции, теперь появились фермиевские функции распределения для дырок и электронов, соответственно.

Чтобы описать такие частично занятые состояния, нам придется ввести новое определение электрона и дырки. Мы будем считать теперь электроном ту часть гриновской функции, которая отлична от нуля при $\tau_2 > \tau_1$, а дырке будет соответствовать ненулевая часть гриновской функции при $\tau_2 < \tau_1$. На диаграммах при конечной температуре теперь в одном состоянии могут находиться одновременно и электрон, и дырка.

Задача: Показать, что $f_k^- = \{1 + \exp[\beta(\epsilon_k - \mu)]\}^{-1}$.

Решение: Вычислим, для начала, матричный элемент статистического оператора на волновых функциях системы невзаимодействующих фермионов $\langle \Phi_l | \hat{w} | \Phi_l \rangle$.

$$\langle \Phi_l | \hat{w} | \Phi_l \rangle = \exp[-\beta \sum_k (\epsilon_k - \mu) n_k^l] = \prod_k \exp[-\beta (\epsilon_k - \mu) n_k^l]. \quad (18.20)$$

Теперь вспомним, что число частиц в нашей подсистеме не фиксировано и может меняться при заданном уровне химического потенциала от нуля до бесконечности. В частности, основным состоянием может быть состояние из нуля частиц, следовательно,

$$Z = 1 + \exp[-\beta (\epsilon_1 - \mu)] + \exp[-\beta (\epsilon_2 - \mu)] + \dots + \exp[-\beta (\epsilon_1 - \mu)] \exp[-\beta (\epsilon_2 - \mu)] + \dots = \prod_k [1 + \exp\{-\beta (\epsilon_k - \mu)\}]. \quad (18.21)$$

$$f_k^- = \langle n_k \rangle = \sum_l \langle n_1^l \dots n_{k-1}^l | c_k^+ c_k | \dots n_k^l \dots n_1^l \rangle \prod_j \exp[-\beta (\epsilon_j - \mu) n_j^l] Z^{-1}. \quad (18.22)$$

Первый множитель под знаком суммы в (18.22) отличен от нуля только, если $n_k^l = 1$. Поэтому

$$\langle n_k \rangle = \{1 + \exp[\beta(\epsilon_k - \mu)]\}^{-1} \left\{ \prod_{l \neq k} [1 + \exp\{-\beta (\epsilon_l - \mu)\}] \right\}^{-1} \left\{ \sum_{n_k^l} \prod_{j \neq k} \exp\{-\beta (\epsilon_j - \mu)\} n_j^l \right\}.$$

Здесь мы вынесли по множителю из второй и третьей фигурных скобок для образования первой фигурной скобки. Произведение двух последних фигурных скобок точно равно единице, что и приводит к нужному соотношению.

S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. (Tokio) 5, 544 (1950).

J.M. Luttinger, J. Math. Phys., 4, 1154 (1963).

V.T. Dolgoplov Phys. Rev.B