

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
КЛАССИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТСКИЙ УЧЕБНИК



И. А. Квасников

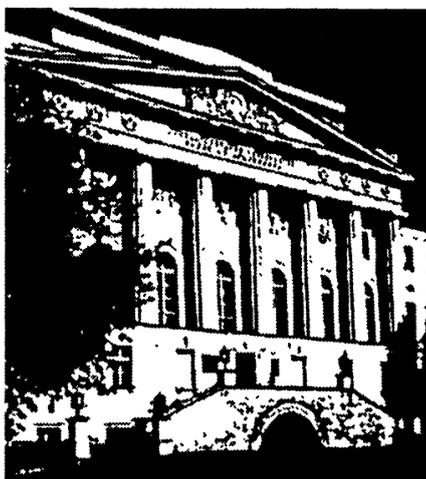
ТЕРМОДИНАМИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Том 4 • Квантовая статистика

Серия
**КЛАССИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТСКИЙ УЧЕБНИК**

основана в 2002 году по инициативе ректора
МГУ им. М.В. Ломоносова
академика РАН В.А. Садовниченко
и посвящена

**250-летию
Московского университета**



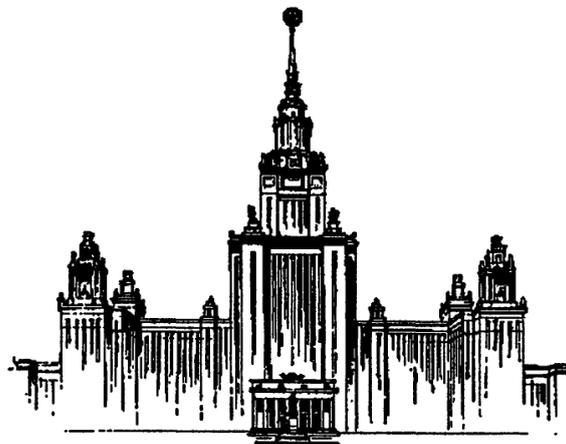
КЛАССИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТСКИЙ УЧЕБНИК

Редакционный совет серии

Председатель совета
ректор Московского университета
В.А. Садовничий

Члены совета:

Виханский О.С., Голиченков А.К., Гусев М.В.,
Добреньков В.И., Донцов А.И., Засурский Я.Н.,
Зинченко Ю.П. (ответственный секретарь),
Камзолов А.И. (ответственный секретарь),
Карпов С.П., Касимов Н.С., Колесов В.П.,
Лободанов А.П., Лунин В.В., Лупанов О.Б.,
Мейер М.С., Миронов В.В. (заместитель председателя),
Михалев А.В., Моисеев Е.И., Пушаровский Д.Ю.,
Раевская О.В., Ремнева М.Л., Розов Н.Х.,
Салецкий А.М. (заместитель председателя), Сурин А.В.,
Тер-Минасова С.Г., Ткачук В.А., Третьяков Ю.Д., Трухин В.И.,
Трофимов В.Т. (заместитель председателя), Шоба С.А.



И. А. Квасников

ТЕРМОДИНАМИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

ТОМ 4

КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

Учебное пособие



URSS

Рецензент:

главный научный сотрудник Института ядерных исследований РАН,
академик РАН *В. А. Рубаков*

Квасников Иридий Александрович

Термодинамика и статистическая физика. Т. 4: Квантовая статистика: Учебное пособие.
М.: КомКнига, 2005. — 352 с. В 4-х т. (Классический университетский учебник.)

ISBN 5-484-00135-8

В основу настоящего учебного пособия положен курс лекций, читаемый автором для студентов теоретических специальностей на физическом факультете МГУ им. М. В. Ломоносова. Данный том посвящен изложению основных постановочных вопросов этого раздела статистической физики, включая двухвременной температурный формализм, с помощью которого рассмотрен ряд традиционных прикладных вопросов теории неидеальных систем, исследуемых методами квантовой статистики. Также подробно рассмотрены особенности неидеального бозе-газа и теория сверхпроводимости.

Для студентов, специализирующихся в области теоретической и математической физики, и аспирантов физических специальностей.

Издательство «КомКнига». 117312, г. Москва, пр-т 60-летия Октября, 9.
Подписано к печати 01.06.2005 г. Формат 70×100/16. Печ. л. 22. Бумага офсетная. Зак. № 120
Отпечатано в ГП «Облиздат». 248640, г. Калуга, пл. Старый Торг, 5.

ISBN 5-484-00135-8 (т. 4)

ISBN 5-484-00136-6

© КомКнига, 2005



Все права защищены. Никакая часть настоящей книги не может быть воспроизведена или передана в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами, будь то электронные или механические, включая фотокопирование и запись на магнитный носитель, а также размещение в Интернете, если на то нет письменного разрешения Издательства.

Предисловие к серии

Уважаемый читатель!

Вы открыли одну из замечательных книг, изданных в серии «Классический университетский учебник», посвященной 250-летию Московского университета. Серия включает свыше 150 учебников и учебных пособий, рекомендованных к изданию Учеными советами факультетов, редакционным советом серии и издаваемых к юбилею по решению Ученого совета МГУ.

Московский университет всегда славился своими профессорами и преподавателями, воспитавшими не одно поколение студентов, впоследствии внесших заметный вклад в развитие нашей страны, составивших гордость отечественной и мировой науки, культуры и образования.

Высокий уровень образования, которое дает Московский университет, в первую очередь обеспечивается высоким уровнем написанных выдающимися учеными и педагогами учебников и учебных пособий, в которых сочетаются как глубина, так и доступность излагаемого материала. В этих книгах аккумулируется бесценный опыт методики и методологии преподавания, который становится достоянием не только Московского университета, но и других университетов России и всего мира.

Издание серии «Классический университетский учебник» наглядно демонстрирует тот вклад, который вносит Московский университет в классическое университетское образование в нашей стране и, несомненно, служит его развитию.

Решение этой благородной задачи было бы невозможным без активной помощи со стороны издательств, принявших участие в издании книг серии «Классический университетский учебник». Мы расцениваем это как поддержку ими позиции, которую занимает Московский университет в вопросах науки и образования. Это служит также свидетельством того, что 250-летний юбилей Московского университета — выдающееся событие в жизни всей нашей страны, мирового образовательного сообщества.



*Ректор Московского университета,
академик РАН, профессор*

В. А. Садовничий

Оглавление

Предисловие к серии	5
Предисловие	11
Глава 1. Статистический оператор и корреляционные функции	15
§ 1. Введение	15
а) Исследования квантово-механического типа	16
б) Исследование системы при отличной от нуля температуре	17
§ 2. Микроскопическое состояние системы N тел	21
а) Фиксация микроскопического состояния системы как чистого квантово-механического состояния	21
б) Фиксация микроскопического состояния системы как смешанного квантово-механического состояния	25
в) Статистический оператор и его свойства	26
1. Нормировка статистического оператора	26
2. Энергетическое представление для равновесного случая	26
3. x -представление статистического оператора системы N частиц и его свойства симметрии	28
4. Уравнение движения для статистического оператора $\rho(t)$	29
5. Эволюция системы в гейзенберговском временном представлении	31
6. Представление взаимодействия для статистического оператора и динамическая теория возмущений	31
7. Уравнение Блоха для равновесной матрицы плотности и термодинамическая теория возмущений	34
8. Статистический оператор в смешанном представлении и функции распределения по микроскопическим параметрам	36
9. Вигнеровское представление статистического оператора и квазиклассический предельный переход	37
§ 3. Представление вторичного квантования	41
а) Построение N -частичного базиса	42
б) Представление чисел заполнения для операторов динамических величин	46
в) Оператор α в бозе-случае	49
г) Бозе-операторы рождения и уничтожения	50
д) Представление вторичного квантования для операторов динамических величин в бозе-случае	51
е) Оператор α в ферми-случае	52
ж) Операторы рождения и уничтожения Паули и Ферми	53
з) Представление вторичного квантования для операторов динамических величин в ферми-случае	55

и) Рациональный выбор f -представления и некоторые основные операторы динамических величин	56
к) Координатное представление операторов рождения и уничтожения (операторные волновые функции)	60
л) Уравнения движения для операторов рождения и уничтожения . . .	60
м) Волновые функции и базис	63
н) Теорема о спариваниях	66
о) Вторичное квантование в случае неоднocomпонентных систем	73
п) Общие замечания: достижения и трудности	77
§ 4. Статистические операторы и s-частичные корреляционные функции . .	81
а) Статистические операторы R_s	81
б) Корреляционные операторы F_s	83
в) Уравнение движения для оператора F_s	83
г) Простейшие случаи	85
д) Связь простейших корреляционных функций с вариациями свободной энергии системы	87
е) Парная корреляционная функция идеальных газов	88
Глава 2. Двухвременные корреляционные функции и функции Грина	99
§ 1. Двухвременные корреляционные функции и их спектральные представления	100
§ 2. Двухвременные температурные функции Грина	104
а) Спектральные представления функций Грина на \mathcal{E} -плоскости	104
б) Обратное соотношение: выражение спектральной плотности через функцию Грина	104
в) Запаздывающие и опережающие функции Грина	105
г) Аналитические свойства функций Грина на энергетической плоскости	107
д) Причинные функции Грина	108
е) Характерный пример — однополюсная функция Грина	110
ж) Общая схема метода двухвременных температурных функций Грина	113
з) Идеальный ферми-газ как пример реализации общей программы исследований	115
Глава 3. Функции Грина и физические характеристики статистических систем . . .	117
§ 1. Равновесные характеристики статистической системы	118
а) Корреляционные функции равновесной системы	118
б) Внутренняя энергия системы	120
в) Термодинамический потенциал Ω	122
§ 2. Реакция системы на внешнее возмущение и ее резонансные свойства	124
а) Временная теория возмущений	124
б) Адиабатическое включение периодического возмущения	126

в)	Возбужденные состояния и резонансные свойства статистической системы	129
г)	Неадиабатическое включение возмущения и процессы релаксации	132
§ 3.	Функции Грина и линеаризованные кинетические уравнения	133
а)	Уравнение движения для динамической реакции средних значений как основа построения кинетических уравнений и запаздывающие функции Грина	133
б)	Построение уравнения для одночастичного статистического оператора и соответствующего ему уравнения для функции Грина	135
в)	Переход к координатно-импульсному представлению и использование аппроксимаций, заложенных в кинетических уравнениях классической теории	140
§ 4.	Рассеяние частиц на статистических системах	145
а)	Рассеяние быстрых частиц	146
б)	Рассеяние электромагнитного излучения	149
§ 5.	Правило суммы для спектральной плотности $J_q(\omega)$	155
§ 6.	Электромагнитные характеристики системы	157
а)	Динамическая диэлектрическая проницаемость	158
б)	Магнитная восприимчивость системы заряженных частиц	169
в)	Электропроводность	177
Глава 4.	Точно решаемые системы и физические задачи, сводимые к ним	185
§ 1.	Общая квадратичная форма в качестве гамильтониана точно исследуемой статистической системы	185
а)	Диагонализация гамильтониана H	186
б)	Метод функций Грина	189
§ 2.	Вырожденный неидеальный бозе-газ и концепция приближенного вторичного квантования по Боголюбову	191
а)	Трудности формальной теории возмущений	192
б)	Приближенное вторичное квантование. Модельный гамильтониан	198
в)	Точное решение статистической задачи для модельной бозе-системы	200
г)	Обсуждение полученных результатов	204
1.	Особенности спектра возбужденных состояний	204
2.	Динамическое размытие конденсата	213
3.	Асимптотика энергии основного состояния	217
4.	Общие выводы	220
§ 3.	Метод приближенного вторичного квантования в системах с парным центральным взаимодействием	221
а)	Модельный гамильтониан бозе-системы и эквивалентное суммирование ряда теории возмущений	222
б)	Неидеальный ферми-газ и возможности метода приближенного вторичного квантования	223

1. Системы частиц с кулоновским взаимодействием	224
2. Ферми-система частиц с короткодействием	231
§ 4. Метод приближенного вторичного квантования в теории ферромагнетизма	233
а) Гейзенберговская модель ферромагнетика	233
б) Возможности теории возмущений	237
в) Приближенное вторичное квантование и сведение к точно решаемой модели	239
г) Термодинамические свойства и намагничение системы в области низких температур	241
Глава 5. Введение в теорию сверхпроводимости электронного газа в металлах	245
§ 1. Основные экспериментальные и теоретические предпосылки теории сверхпроводимости	245
§ 2. Исследование системы с прямым эффективным взаимодействием электронов	256
а) Выделение части гамильтониана, ответственной за формирование куперовских состояний	256
б) $(u-v)$ -преобразование Боголюбова ферми-операторов исходной модели	257
в) Статистический вариационный принцип Н. Н. Боголюбова	260
г) Использование вариационного принципа для определения коэффициентов $(u-v)$ -преобразования	262
д) Исследование уравнения (*) для энергетической щели в случае упрощенной модели взаимодействия $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$	268
е) Термодинамические свойства модельного сверхпроводника	272
§ 3. Обсуждение	275
а) Теплоемкость сверхпроводников	275
б) Величина критического магнитного поля	276
в) Качественный учет кулоновского взаимодействия	278
г) Вариационное приближение и асимптотическая точность полученных результатов	280
д) Принцип компенсации «опасных диаграмм»	284
е) Общая структура возбужденных состояний сверхпроводящего и нормального электронного газа в металлах	286
Глава 6. Расщепление системы уравнений для функций Грина	291
§ 1. Общие положения	291
§ 2. Электронный газ в компенсирующем поле кристаллической решетки	299
а) Динамические особенности системы	299
б) Функция Грина типа плотность-плотность в главном приближении	301
в) Формальные свойства поляризационного оператора $\Pi(q, \mathcal{E})$	304
г) Спектральные свойства и диэлектрические характеристики системы	310

д) Термодинамический потенциал и выражающиеся с его помощью величины	314
§ 3. Обсуждение	327
Глава 7. Электронный газ в статическом поле случайно расположенных рассеивающих центров	331
§ 1. Введение. Исходные уравнения для одночастичной функции Грина и массового оператора	331
§ 2. Усреднение по расположениям центров рассеяния	334
§ 3. Энергия и затухание одночастичных возбуждений во втором порядке по взаимодействию электронов с частицами тяжелой примеси	338
§ 4. Оценка удельного сопротивления электронного газа и обсуждение	342
Послесловие	344

Для ориентировки в общем плане всего учебного пособия «Термодинамика и статистическая физика» и понимания встречающихся ссылок на материал предыдущих томов, приводим общую схему пособия (только названия глав, без конкретизации параграфов).

И. А. Квасников. Термодинамика и статистическая физика.

Том 1. Теория равновесных систем. Термодинамика.

Глава 1. Аксиоматика макроскопической термодинамики и некоторые общие вопросы теории

Том 2. Теория равновесных систем. Статистическая физика.

Глава 1. Основные положения статистической механики равновесных систем. Распределения Гиббса

Глава 2. Идеальные системы в статистической механике

Глава 3. Статистическая механика неидеальных равновесных систем (некоторые вопросы теории)

Том 3. Теория неравновесных систем.

Глава 1. Теория флуктуаций

Глава 2. Брауновское движение

Глава 3. Некоторые вопросы теории случайных процессов

Глава 4. Термодинамическая теория необратимых процессов

Глава 5. Кинетические уравнения в статистической механике

(Все главы томов 1, 2 и 3 включают разделы задач и дополнительных вопросов.)

Предисловие

Предлагаемый четвертый, последний том курса с общим названием «Термодинамика и статистическая физика» по представленному в нем материалу и стилю изложения заметно отличается от предшествующих ему выпусков. Если первые три тома курса отражали в разумной степени расширенный материал, предназначенный слушателям 4-го курса физического факультета всех специализаций, то та часть статистической физики, которая по традиции именуется квантовой статистикой, предлагалась уже более подготовленным слушателям — студентам 5-го курса теоретических специализаций.

Именно с этим в основном связано определенное отличие стиля и характера изложения материала данного тома от использованного в предыдущих выпусках курса. В первую очередь это связано с тем, что в излагаемом разделе статистической теории, посвященном главным образом рассмотрению неидеальных квантовых систем, эффективно используются методы квантовой теории поля с обязательным привлечением представления вторичного квантования, в то время как в предыдущих томах 1–3 в использовании этого представления (кроме единичного случая, и то с целью иллюстрации) необходимости не возникало даже при изложении теории идеальных квантовых бозе- и ферми-газов.

Далее, так как содержание этого тома основано на лекционном материале спецкурса, не разделяемого в отличие от общефакультетских курсов на «лекции» и «семинары», то и данное пособие в отличие от томов 1–3 не содержит в конце своих глав разделов задач и дополнительных вопросов (на это не хватило бы апробированного материала и представляющих физический интерес сюжетов).

Ввиду того что этих «сюжетов» в квантовой статистике не так уж много, автор не посчитал целесообразным при наличии весьма подробного оглавления приводить в конце книги предметный указатель. Автор счел нецелесообразным приводить также и именную указатель, совмещенный с упоминанием оригинальных работ, так как эти публикации (в основном в виде статей в научных журналах) весьма многочисленны и разнохарактерны по строгости и методике изложения, и полный их реестр типа тех, что украшают солидные диссертации с целью подтвердить глубокую осведомленность соискателя, в данном случае, когда мы имеем дело с учебным пособием, совершенно бесполезен, тем более что эти источники уже не являются свежими.

Курс «Квантовая статистика» на физическом факультете МГУ стал читаться автором, инициатива которого была поддержана заведующим кафедрой теоретической физики академиком Н. Н. Боголюбовым, с 1961 года, в период, когда общий интерес к проблемам квантовой электродинамики и квантовой теории поля начал спадать, а в области статистической физики стали широко применяться квантово-полевые методы исследования. Это привело не только к переосмыслению и переформулировке традиционных проблем квантовой теории систем многих тел, но и к значительному и общепризнанному успеху этих методов, связанному в первую очередь с построением в 1957–1958 годах микроскопической теории сверхпроводимости.

Многолетний опыт автора убедил его в том, что предусмотренный существующими программами (с жестким ограничением отведенного для их усвоения числа учебных часов) материал общих курсов по теоретическим дисциплинам, в частности

по квантовой механике и статистической физике, даже в случае его стопроцентного усвоения все же недостаточен для полного внутреннего осознания этих дисциплин. Система спецкурсов по математическим и теоретическим разделам, дополняющим и развивающим часто второпях изложенный материал общих курсов, смягчает эту недостаточность в той мере, в которой это можно осуществить в рамках отведенного одно- или двухсеместрового учебного времени силами по случаю оказавшихся в орбите учебного процесса квалифицированных специалистов-энтузиастов.

Естественно, что спецкурсы, являясь по самому замыслу учебными, обычно строятся на достоверном и общепризнанном материале уже решенных проблем теоретической физики. Это сопутствующее им постоянное отставание от «новейших» открытий и методик (многие из которых оказывались впоследствии ложными или надуманными и поэтому оставались невостребованными) в свое время компенсировалось тем, что регулярно (т. е. еженедельно в одни и те же дни и часы) функционировавшие научные семинары (ныне почти что совсем затухшие) на физическом факультете МГУ и в теоретических отделах академических институтов МИАН, ИФП и ФИАН, руководимые авторитетнейшими мэтрами, составлявшими тогда славу отечественной науки, также регулярно посещались студентами-теоретиками, аспирантами и молодыми сотрудниками физического факультета, где они как минимум визуально знакомились с ведущими физиками и теоретиками нашей страны и зарубежья, узнавали их мнение по актуальным проблемам научных исследований и где они, присутствуя при обсуждении самых свежих теоретических разработок, получали возможность постоянно быть в курсе последних достижений в области теоретической и экспериментальной физики.

Ныне интерес к теоретическим, да и вообще к научным исследованиям по признанию ведущих авторитетов в этих областях значительно снизился. Соблазны «роскошной жизни», проповедуемой по каналам TV и красочными рекламами в средствах массовой информации, подавляют стремление молодого поколения к общему интеллектуальному развитию и приобретению научных знаний, требующих значительных затрат времени и напряженного труда. Престижным стало обучение на скорую руку (соблазняющая практика «фабрики звезд») методике менеджмента, сулящей заманчивые материальные перспективы еще не освоенного местного прикладного бизнеса (как тут не вспомнить нашего великого поэта, сказавшего устами столь же великого композитора: «Нас мало, избранных...», — это о любителях гармонии, «пренебрегающих презренной пользой»).

Материал, который следовало бы включить в качестве продолжения общего курса статистической физики, не только обширен и тематически неоднороден в теоретической своей части, но и охватывает целый ряд интересных прикладных проблем, не нашедших своего окончательного теоретического объяснения. Отразить весь этот достаточно разнородный материал не в рекламном обзоре, а в одном учебном пособии, конечно, невозможно (тем более в ограниченном по времени годовом спецкурсе). Если же ограничиться только той его частью, которая включает до конца и грамотно решенные задачи, то окажется, что наиболее существенные результаты в этом продвижении и развитии методов статистической теории были достигнуты в области неидеальных квантовых систем при использовании самых простых и подчас откровенно модельных представлений о взаимодействии частиц, весьма далеких от реально существующих в физических системах многих тел.

Тематика данного пособия достаточно полно отражена в оглавлении. Она не перегружена обсуждением спорных и нерешенных проблем и представляет вполне стандартный набор сюжетов, которые могут служить в учебном курсе в качестве показательных, до конца исследованных проблем квантовой статистики. С микроскопической точки зрения все они основываются на рассмотрении достаточно

упрощенных в динамическом плане модельных представлений. Естественно, что при таком подходе становится целесообразным ограничиваться получением лишь основных характерных для данной проблемы результатов, оставляя право читателю продолжить исследование с целью получения высших приближений, физическая ценность которых вследствие упомянутой выше модельности постановки задачи оказывается в большинстве случаев уже проблематичной.

Взросший интерес к методам квантовой статистики привел к появлению изданий, имеющих явно учебный характер. Одним из первых таких пособий явилась книга Н. Н. Боголюбова «Лекции по квантовой статистике» (Киев, 1949), включающая помимо общих постановочных вопросов изложение его оригинальной работы 1946 года по слабо-неидеальному бозе-газу и исследование полярной теории металлов. Несколько позже, уже в 60-е годы, появились имеющие тоже вполне учебный характер солидные руководства Д. А. Киржница, посвященные исследовательскому развитию динамической теории возмущений в диаграммном ее варианте применительно к неидеальному ферми-газу, В. М. Галицкого (ферми-газ низкой плотности) и достаточно всеобъемлющая и включающая также изложение температурной матсубаровской техники книга трех авторов, А. А. Абрикосова, Л. П. Горькова и И. Е. Дзялошинского (ставших теперь новыми американцами).

Предлагаемое пособие несколько отличается от упомянутых (и еще многих не названных, но не менее ценных) руководств в первую очередь тем, что если в большинстве из них основной акцент делается на развитие в той или иной модификации теории возмущений (т. е. изначально регулярного метода разложения по константе взаимодействия) с использованием квантовой техники суммирования определенных последовательностей вкладов от диаграмм, то в данном пособии основное внимание уделяется методу двухвременных температурных функций Грина, удачно сформулированному Н. Н. Боголюбовым в его статьях и в небольшом цикле лекций, которые он прочел для теоретиков на физическом факультете МГУ.

При написании четвертого тома, как и в предыдущих выпусках курса «Термодинамика и статистическая физика», автор по возможности старался сохранить стиль лекционного изложения материала, рассчитанный на то, чтобы слушатель, пропустивший какую либо из предыдущих лекций (а теперь и читатель, открывший книгу не с самого начала) мог бы без особого напряжения (и перелистывания книги вплоть до первой страницы) сразу и до конца войти в суть производимых математических действий и используемых аппроксимаций без дополнительного их «домашнего» додумывания. Это несколько удлиняет изложение, так как связано с неизбежным повторением некоторых отправных моментов проводимого конкретного исследования и более подробными пояснениями (так что подобный стиль может показаться эрудированному читателю, привыкшему к монографическому характеру изложения материала, слишком «примитивным»), зато позволяет, как и в предыдущих томах пособия, избегать не только сплошной нумерации всех встречающихся формул, но и многочисленных ссылок на оригинальные научные публикации, обзорные статьи и т. п., которые в лекционном курсе бесполезны, а любители ссылок могут с избытком набрать их, используя соответствующие каталоги научных библиотек.

Ввиду того что «история» квантовой статистики по сравнению с периодом становления теоретической физики относительно невелика (и имеет масштаб одного научного поколения), автор не стал дополнять вполне солидные предметные и авторские указатели предыдущих томов, ограничившись соответствующими пояснениями в самом тексте книги.

В монографической научной литературе подчас используется в известной мере обзорный стиль изложения, когда, говоря о каком-либо научном достижении или

расчете эффекта, выполненном авторитетным специалистом в этой области, сообщается обеспечивающая приоритет оригинальная публикация на данную тему, дается ссылка и общий комментарий без особых математических подробностей. Подобная манера изложения, по-существу снимающая с автора ответственность за достоверность излагаемого материала, проникла даже в издания, претендующие на учебные. Автор не считает, что подобный стиль бесполезен и малоэффективен, но все же он вряд ли уместен в лекционном курсе, в котором должны соблюдаться последовательность изложения, полная аргументированность используемых приближений (без ссылок типа «следуя процедуре, предложенной (авторитетное имя), положим, что...»), единые обозначения и полная без пропусков математическая обработка предоставляемого аудитории материала на доступном ей языке (и без ссылок типа «легко показать, что...»). Лекции — это все же не доклад на очередной конференции, где, мелькая перед аудиторией «прозрачками» и набранными на компьютере страничками, за отведенные считанные минуты можно объявить о сделанном докладчиками открытии, совершенно не опасаясь, что эти странички кто-либо из слушателей успеет проверить, осмыслить и аргументированно прокомментировать.

Автор отдает себе отчет, что так как всякое изложение какого-либо из обсуждаемых вопросов явно или между строк неизбежно отражает его личное мнение (сколь бы он не старался быть объективным), которое не обязательно составляет истину в последней инстанции, то не исключено, что некоторым читателям оно может показаться спорным (это касается также и всего сказанного выше).

Несмотря на то что данный том является вполне автономным сочинением, как и каждый из уже вышедших трех томов пособия по курсу «Термодинамика и статистическая физика», он образует вместе с ними общий цикл учебных пособий по данной дисциплине и в этом смысле не оказывается от них изолированным. В связи с этим совершенно неизбежно возникает необходимость в ссылках на изложенные в предыдущих выпусках общие положения теории и целый ряд конкретных решений частных вопросов, имеющих непосредственное отношение к излагаемому в данном томе материалу. Эти ссылки, лишь напоминающие пройденный материал и не нарушающие логику изложения, будут обозначаться по мере надобности номером тома с последующим указанием главы и параграфа.

Статистический оператор и корреляционные функции

В данной вводной главе остановимся на некоторых общих вопросах статистической механики, с тем чтобы представить себе задачи этого раздела теоретической физики, специфику изучаемых в нем систем и сам характер этих исследований. Полагая, что читатель знаком с основными положениями нерелятивистской квантовой механики и статистической физики, мы все же, чтобы не заставлять читателя разыскивать подзабытый им материал в учебных руководствах, остановимся на некоторых важных и специфических для рассматриваемых систем моментах, не задерживаясь на подробном изложении всего круга идей микроскопической теории и ограничиваясь большей частью введением обозначений и определений (более подробно см. курс т. 1, 2, 3).

§ 1. Введение

Существующий аппарат статистической механики, который мы будем использовать, предназначен для исследования так называемых термодинамических (или статистических) систем, основным свойством которых является их многотельность, это системы большого числа взаимодействующих друг с другом и внешними полями частиц, причем число их N настолько велико, что принято измерять его не поштучно, а сразу в масштабе числа Авогадро $N_0 \sim 10^{23}$. В связи с этим статистическая система оказывается макроскопическим объектом лабораторных размеров (в отношении как своей массы, так и объема), макроскопическое состояние которого можно характеризовать и фиксировать макроскопическими же величинами, определяемыми по показаниям находящихся в контакте с исследуемой системой приборов, также являющихся макроскопическими многотельными объектами.

Одна из специфических и обязательных особенностей статистической системы заключается в том, что для заданного набора макроскопических параметров система имеет определенное и единственное состояние термодинамического равновесия, в котором она не обязательно находится, но которого она при фиксированных внешних условиях согласно так называемому нулевому началу термодинамики самопроизвольно достигает. (Под состоянием термодинамического равновесия мы подразумеваем такое состояние системы, когда ее макроскопические параметры не меняются с течением времени и когда в системе отсутствуют макроскопические потоки любых типов.)

Далее, мы будем считать, что квазистатические изменения этих состояний подчинены аксиомам или началам термодинамики, поэтому, как только в этом возникает необходимость, мы будем использовать весь формализм основанной на этих началах макроскопической теории. С микроскопической точки зрения структура равновесного состояния системы представляется известной и в зависимости от выбора термодинамических параметров, фиксирующих состояние системы, определяемой соответствующим распределением Гиббса.

Отметим, наконец, что сами термодинамические параметры системы многих частиц и ее физические макроскопические характеристики имеют определенные свойства аддитивности по отношению к зависимости их от числа частиц N . Эти свойства, которые могут быть только двух типов, непосредственно проявляются при делении системы на макроскопические части и обеспечивают выполнимость термодинамических соотношений в макроскопических частях статистической системы. В статистической теории эти условия термодинамической аддитивности обеспечиваются с помощью специальной статистической предельной процедуры $N \rightarrow \infty$, $v = V/N = \text{const}$ (здесь для наглядности мы ввели только одну, кроме самого числа N , характеристику аддитивного типа — объем системы V). Эта формальная процедура (с физической точки зрения статистическая система всегда конечна), во-первых, позволяет выделить основную по N асимптотику физической характеристики системы, которая для величин аддитивного типа имеет вид

$$F(\theta, V, N) \stackrel{\text{as}}{=} N f(\theta, v),$$

а для неаддитивных величин —

$$\Phi(\theta, V, N) \stackrel{\text{as}}{=} \varphi(\theta, v)$$

(для простоты мы ввели в качестве аргумента только один термодинамический параметр исходного неаддитивного типа — температуру θ ; удельный объем $v = V/N$ и все другие удельные величины — удельная внутренняя энергия $\varepsilon(\theta, v) = \mathcal{E}(\theta, V, N)/N$, удельная теплоемкость $c_{VN}(\theta, v) = C_{VN}(\theta, V, N)/N$ и т. д. тоже являются неаддитивными, но уже «производными» величинами), а во-вторых, делает результаты исследования системы в главных по N асимптотиках независимыми от выбора того или иного варианта статистического формализма.

Естественно, что не всякая система N тел является статистической и требование ее статистичности налагает определенные условия на взаимодействие частиц друг с другом. Для определенности мы будем полагать, что силы взаимодействия частиц имеют конечный радиус действия или (как в случае кулоновского взаимодействия) в принципе экранируемы.

Приступая к рассмотрению какой-либо конкретной статистической системы, мы будем полагать, что она задана микроскопически (т. е. точно так же, как она задается в механике), именно, исходным моментом в наших исследованиях будет являться задание гамильтониана системы $H = H_0 + H_1$ и внешних условий, характеризующих макроскопическое состояние системы в целом. Так как идеальные системы, характеризующиеся гамильтонианом H_0 , достаточно хорошо исследованы (см. т. 2, гл. 2), то основным моментом задания системы является определение вида оператора H_1 — гамильтониана взаимодействия частиц друг с другом (так как структура реальных молекул, являющихся частицами системы, обычно весьма сложна, на практике чаще всего ограничиваются разумным моделированием этой весьма ответственной части гамильтониана).

Само рассмотрение заданных таким образом систем обычно складывается из исследований двух типов.

а) Исследования квантово-механического типа

Эти исследования, прежде всего, включают анализ основного состояния системы, его структуры и энергии, а также макроскопических характеристик системы, находящейся в этом состоянии. Далее, это исследование отдельных возбужденных

состояний и их характера (индивидуальные или квазичастичные возбуждения, коллективные возбуждения системы и т. д.), определение их энергии, затухания (или времени жизни этих возбуждений) и т. д. Наконец, это исследования простейших неравновесных процессов в системах. Эти исследования, по существу, составляют уже целый самостоятельный раздел статистической физики и включают очень большой круг вопросов как общего постановочного, так и прикладного характера. По сравнению с рассмотрением кинетики классических систем (см. т. 3, гл. 5), подобные исследования квантовых систем очень сложны и, к сожалению, малорезультативны. В связи с этим вполне разумно остановиться в дальнейшем на тех неравновесных процессах, которые вполне укладываются в теорию слабонеравновесных состояний (что в идейном отношении эквивалентно использованию линеаризованной схемы кинетических уравнений).

Для исследований квантово-механического типа характерно отсутствие температуры как макроскопического параметра. Это — исследования системы при абсолютном нуле температуры. Отдельные возбуждения системы, как бы велики по энергии они ни были, не создают «температурного» состояния статистической системы, так как для появления такой характеристики, как температура, необходимо наличие в системе не единичных возбуждений, а как бы «газа» таких возбуждений, «плотность» которого не исчезает в предельном статистическом случае $N \rightarrow \infty$, $v = V/N = \text{const}$. Однако исследование таких состояний системы относится уже к иному типу.

б) Исследование системы при отличной от нуля температуре

Исследования указанного типа включают предыдущий случай как частный при $\theta \rightarrow 0$ и совершенно так же состоят в исследовании равновесных характеристик системы (обобщение рассмотрения основного состояния системы), ее возбужденных состояний над равновесным и простейших задач неравновесной теории.

Так как исследование равновесных состояний системы в микроскопической теории основывается на использовании распределений Гиббса, мы воспользуемся одним из двух наиболее эффективных и удобных вариантов этого метода.

Если в качестве параметров термодинамического состояния выбираются величины θ, V, N (для простоты мы не пишем характеристик внешних силовых полей и т. п.), то свободная энергия

$$\mathcal{F}(\theta, V, N) = -\theta \ln Z,$$

являющаяся термодинамическим потенциалом в этих переменных, определяется через статистическую сумму $Z(\theta, V, N)$, которую мы запишем в виде

$$Z = \sum_n e^{-E_n/\theta} = \sum_n \langle nN | e^{-H/\theta} | nN \rangle = \text{Sp} e^{-H/\theta},$$

где мы обозначили символом $|nN\rangle$ собственные функции оператора Гамильтона H для системы N тел,

$$H|nN\rangle = E_n(N)|nN\rangle,$$

и где n — полный набор квантовых чисел, фиксирующих стационарное состояние системы из N частиц.

Заметим, что несмотря на естественность выбора в качестве макроскопических параметров состояния величин θ, V, N , этот выбор не всегда оказывается удобным при проведении конкретных исследований в микроскопической теории. Так, уже при рассмотрении идеальных квантовых газов фиксация числа N приводит к формальному усложнению расчета термодинамических характеристик. Эту математическую

трудность можно естественным образом обойти, выбрав в качестве параметров состояния системы величины θ, V, μ , где μ — химический потенциал системы. В этих переменных термодинамическим потенциалом является потенциал Гиббса

$$\Omega(\theta, V, \mu) = -\theta \ln \zeta,$$

где так называемая большая сумма состояний $\zeta(\theta, V, \mu)$ определяется как

$$\zeta = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\mu N/\theta} Z(\theta, V, N) = \sum_{Nn} \langle nN | e^{-(H-\mu N)/\theta} | nN \rangle = \text{Sp } e^{-(H-\mu N)/\theta}.$$

Конечно, при этом все термодинамические характеристики, которые выражаются с помощью потенциала $\Omega(\theta, V, \mu)$, определяются как функции θ, V и химического потенциала μ , который, в отличие от температуры, объема и числа частиц (т. е. количества вещества) физическими приборами не измеряется. Чтобы пересчитать эти результаты к более удобным с практической точки зрения переменным θ, V, N , выражение для термодинамического числа частиц N в переменных θ, V, μ обращается относительно химического потенциала:

$$N = -\frac{\partial \Omega(\theta, V, \mu)}{\partial \mu} = N(\theta, V, \mu) \mapsto \mu = \mu(\theta, V, N),$$

который затем исключается из результатов, например,

$$\mathcal{F}(\theta, V, N) = \Omega(\theta, V, \mu(\theta, V, N)) + N\mu(\theta, V, N).$$

Таким образом, основная задача равновесной статистической механики состоит в разработке методов расчета или оценки в каком-либо конкретном приближении статистической суммы $\text{Sp } e^{-H/\theta}$ или большой статистической суммы $\text{Sp } e^{-(H-\mu N)/\theta}$. Откладывая обсуждение этого вопроса до соответствующего раздела, заметим одну особенность этих величин: независимость результата операции $\text{Sp } \mathcal{A}$ от квантово-механического представления, в котором подсчитывается след матрицы \mathcal{A} . Напомним, что собственные функции оператора H нам, как правило, не известны (первоначальная запись суммы Z является поэтому чисто символической). В связи с этим мы не можем воспользоваться энергетическим представлением как рабочим представлением и будем выбирать его вариант, исходя из других, практических соображений.

Докажем теперь это свойство операции $\text{Sp } \mathcal{A}$, одновременно воспользовавшись случаем ввести обозначения необходимых нам в дальнейшем операций. Предположим, что мы располагаем двумя полными наборами ортогональных и нормированных функций

$$\Psi = \{\psi_n(x)\} \text{ и } \Psi' = \{\psi'_\alpha(x)\},$$

которые мы выбираем в качестве базисных. Определяя оператор преобразования U одного базиса в другой с помощью матрицы

$$\langle n|U|\alpha \rangle = (\psi_n^*(x), \psi'_\alpha(x)),$$

где скалярное произведение в круглых скобках означает интегральную свертку по всем значениям x , мы можем в сокращенном матричном варианте записать связь базисных многообразий Ψ и Ψ' в виде

$$\Psi' = \Psi U,$$

причем

$$U^+ U = I, \quad U^{-1} = U^+.$$

Если оператор динамической величины A в n - и α -представлениях определить матрицами \mathfrak{A} и \mathfrak{A}' , отдельные элементы которых определяются базисными функциями $\psi_n(x)$ и $\psi'_\alpha(x)$,

$$\langle n|\mathfrak{A}|n'\rangle = (\psi_n^*(x), \mathfrak{A}\psi_{n'}(x)), \quad \langle \alpha|\mathfrak{A}'|\alpha'\rangle = (\psi'_\alpha{}^*(x), \mathfrak{A}'\psi'_{\alpha'}(x)),$$

то переход от представления к представлению также будет определяться оператором преобразования U

$$\mathfrak{A}' = U^+ \mathfrak{A} U.$$

Заметим, наконец, что функция какого-либо квантово-механического состояния системы

$$\Psi(x) = \sum_n \Phi(n, t) \psi_n(x) = \sum_\alpha \Phi'(\alpha, t) \psi'_\alpha(x)$$

в рассматриваемых n - и α -представлениях определяется векторами

$$\Phi(t) = \{\Phi(n, t)\} \quad \text{и} \quad \Phi'(t) = \{\Phi'(\alpha, t)\}$$

с законом преобразования

$$\Phi' = U^+ \Phi.$$

В свете вышесказанного необходимое свойство величин, записываемых как $\text{Sp } \mathfrak{A}$, становится очевидным,

$$\text{Sp } \mathfrak{A}' = \text{Sp } U \mathfrak{A} U^+ = \text{Sp } U^+ U \mathfrak{A} = \text{Sp } \mathfrak{A}$$

или

$$\sum_\alpha \langle \alpha|\mathfrak{A}'|\alpha\rangle = \sum_n \langle n|\mathfrak{A}|n\rangle.$$

Мы воспользовались здесь известным правилом циклической перестановки операторов под знаком Sp ,

$$\text{Sp } AB = \sum_{nm} \langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle = \sum_{mn} \langle m|B|n\rangle \langle n|A|m\rangle = \text{Sp } BA$$

(предполагается, что исходное и конечное выражения в этом равенстве существуют как конечные величины и что мы имеем право при расчете произведения матриц переставлять порядок суммирований).

Мы будем полагать, что в предельном случае $\theta \rightarrow 0$ результаты исследования равновесной статистической системы начинают соответствовать результатам исследования системы, находящейся в основном состоянии. Действительно, представляя собственные значения оператора Гамильтона в виде $E_n = E_0 + \Delta_n$, где E_0 — энергия основного состояния, а для $n \neq 0$ величины $\Delta_n > 0$, и полагая эти возбужденные состояния системы ω_n -кратно вырожденными, можно записать каноническое распределение в предельном случае $\theta \rightarrow 0$ в виде

$$w_n = \frac{e^{-E_n/\theta}}{\sum_n e^{-E_n/\theta}} = \frac{e^{-(E_0+\Delta_n)/\theta}}{e^{-E_0/\theta} \left(1 + \sum_{\Delta_n>0} \omega_n e^{-\Delta_n/\theta}\right)} \rightarrow e^{-\Delta_n/\theta} \rightarrow$$

$$\rightarrow \begin{cases} 1 & \text{в случае } n = 0, \Delta_0 = 0, \\ 0 & \text{в случае } n \neq 0, \Delta_n > 0. \end{cases}$$

Таким образом, среднее по статистическому распределению превращается в пределе $\theta \rightarrow 0$ в среднее по основному состоянию системы

$$\langle F \rangle \Big|_{\theta \rightarrow 0} = \sum_n \langle n | F | n \rangle w_n \Big|_{\theta \rightarrow 0} \rightarrow \langle 0 | F | 0 \rangle.$$

Не выясняя конкретного характера стремления к нулю однократной суммы по возбужденным ($n \neq 0$) уровням энергии $\sum \omega_n e^{-\Delta_n/\theta}$, существенно зависящего от структуры входящих в нее выражений для Δ_n и ω_n , отметим предельные при $\theta \rightarrow 0$ значения основных термодинамических величин: свободная энергия при $\theta \rightarrow 0$

$$\mathcal{F} = -\theta \ln \sum_n e^{-E_n/\theta} = E_0 - \theta \ln \left(1 + \sum_{\Delta_n > 0} \omega_n e^{-\Delta_n/\theta} \right) \rightarrow E_0$$

стремится к энергии основного состояния системы $E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle$, внутренняя энергия согласно уравнению Гиббса—Гельмгольца

$$\mathcal{E} = -\theta^2 \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \theta} = E_0 + \frac{\sum_{\Delta_n > 0} \omega_n \Delta_n e^{-\Delta_n/\theta}}{\left(1 + \sum_{\Delta_n > 0} \omega_n e^{-\Delta_n/\theta} \right)} \rightarrow E_0$$

также стремится к этому же пределу, и энтропия системы

$$S = \frac{\mathcal{E} - \mathcal{F}}{\theta} = \ln \left(1 + \sum_{\Delta_n > 0} \omega_n e^{-\Delta_n/\theta} \right) + \frac{\sum_{\Delta_n > 0} \omega_n \frac{\Delta_n}{\theta} e^{-\Delta_n/\theta}}{\left(1 + \sum_{\Delta_n > 0} \omega_n e^{-\Delta_n/\theta} \right)} \rightarrow 0$$

стремится к нулю в полном соответствии с III началом термодинамики.

Наконец, несколько слов об элементарных возбуждениях статистических систем при $\theta \neq 0$. Такие возбуждения в физических системах реально существуют (например, акустические колебания или соответствующие им «частицы» — фононы, плазменные колебания или плазмоны, распространяющиеся колебания намагниченности или спиновые волны и т. д.), причем характеристики спектров этих возбуждений зависят от термодинамических параметров, в частности и от температуры. В отличие от исследований системы при абсолютном нуле температуры, мы не можем позимствовать само понятие возбужденного состояния из квантовой механики (так как мы не располагаем соответствующим температурным «уравнением Шредингера»). В теоретическом отношении это понятие нам предстоит еще формально определить. Заметим, что при $\theta \neq 0$ все квантово-механические возбужденные состояния системы, т. е. все собственные значения и собственные функции оператора Гамильтона

$$E_n = \langle n | H | n \rangle, \quad \psi_n = | n \rangle,$$

формирующие статистическую сумму Z и распределение Гиббса, уже участвуют в образовании смешанного термодинамического равновесного состояния системы. Поэтому и описание состояния системы с отдельным «возбуждением» над ее равновесным состоянием также не может обойтись без привлечения квантово-механических возбуждений в процедуре усреднения, приводящей к появлению температурной зависимости энергии и времени жизни возбужденного состояния. Мы увидим в дальнейшем, что это понятие естественным образом связано с резонансными свойствами статистической системы.

§ 2. Микроскопическое состояние системы N тел

В соответствии с указанными выше двумя типами исследований статистических систем для описания их микроскопических состояний обычно тоже используют две известные в квантовой механике возможности. Рассмотрим их в той же последовательности.

а) Фиксация микроскопического состояния системы как чистого квантово-механического состояния

Согласно существующей с 1924 г. квантовой механике, микроскопическое состояние системы считается заданным, если во временном шредингеровском представлении, которым мы пока только и ограничимся, определена N -частичная волновая функция

$$\Psi = \Psi(x_1, \dots, x_N; t),$$

где в качестве каждого из x_i могут быть использованы, например, совокупности координаты и спина частицы, $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ (координатно-временное представление), импульса и спина, $x_i = (\mathbf{p}_i, \sigma_i)$ (импульсное представление), и т. д.

Прежде всего, необходимо отметить, что микроскопическое состояние квантовой системы из N одинаковых частиц может характеризоваться волновой функцией с определенными свойствами симметрии по отношению к перестановкам аргументов x_1, \dots, x_N (или, что то же, перестановкам нижних индексов $1, \dots, N$).

Согласно квантово-механическому принципу тождественности составляющих систему объектов, Ψ -функция по отношению к этим перестановкам должна быть либо всегда симметричной, либо антисимметричной. Системы, состояния которых описываются симметричными волновыми функциями, называются бозе-системами (S. Bose, A. Einstein, 1924), антисимметричными волновыми функциями — ферми-системами (E. Fermi, P. Dirac, 1925–1926). Обозначая символом λ_P четность перестановки P , равной четности числа составляющих ее парных перестановок P_{ij} , имеем

$$P\Psi = \begin{cases} \Psi & \text{в случае бозе-системы,} \\ (-1)^{\lambda_P} \Psi & \text{в случае ферми-системы.} \end{cases}$$

Естественно, что требования к характеру симметрии волновых функций системы одинаковых частиц проще всего учесть непосредственно при выборе базиса $\Psi = \{\psi_\xi(x)\}$, где $x = x_1, \dots, x_N$, с помощью которого мы будем представлять состояние системы. Потребуем, чтобы в зависимости от типа рассматриваемой системы каждая базисная функция удовлетворяла бы указанным выше свойствам симметрии

$$P\psi_\xi(x_1, \dots, x_N) = \begin{cases} \psi_\xi(x_1, \dots, x_N) & \text{для бозе-систем,} \\ (-1)^{\lambda_P} \psi_\xi(x_1, \dots, x_N) & \text{для ферми-систем} \end{cases}$$

(при этом, конечно, системы таких базисных функций уже не являются полными). Тогда волновую функцию какого-либо рассматриваемого нами «состояния k » бозевской или фермиевской системы N частиц можно представить как разложение

$$\Psi_k(x, t) = \sum_{\xi} \Phi_k(\xi, t) \psi_\xi(x),$$

а само «состояние k » определить уже в генерируемом выбранным базисом ξ -представлении с помощью вектора $\Phi_k(t) = \{\Phi_k(\xi, t)\}$. Эволюция волновой функции,

представленной совокупностью амплитуд $\Phi_k(\xi, t)$, описывается уравнением Шредингера (E. Schrödinger, 1926), которое в выбранном нами ξ -представлении имеет вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_k(\xi, t) = \sum_{\xi'} \langle \xi | H | \xi' \rangle \Phi_k(\xi', t),$$

где

$$\langle \xi | H | \xi' \rangle = (\psi_{\xi'}^*(x), H \psi_{\xi'}(x))$$

— оператор Гамильтона в этом представлении. В более компактной матричной записи это уравнение и его символическое решение имеют вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_k(t) = H \Phi_k(t); \quad \Phi_k(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Phi_k(0) = U^+(t) \Phi_k(0),$$

где оператор $U^+(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ является оператором преобразования состояния системы (оператором эволюции) от начального момента времени $t = 0$ к конечному моменту времени t .

Остановимся еще на одном способе фиксации чистого квантово-механического состояния системы, который нам понадобится в дальнейшем. Заметим, что, говоря о каком-либо способе задания микроскопического состояния системы, мы полагаем, что этот способ не только позволяет проследить за эволюцией так определенного состояния, но и получить любую (в рамках рассматриваемой теории) интересующую нас информацию о физических особенностях системы. В квантовой теории эта информация реализуется в виде квантово-механических средних от операторов динамических величин \mathcal{A} ,

$$\langle k | \mathcal{A} | k \rangle = (\Psi_k^*(x, t), \mathcal{A} \Psi_k(x, t)) = \sum_{\xi \xi'} \Phi_k(\xi, t) \Phi_k^*(\xi', t) \langle \xi' | \mathcal{A} | \xi \rangle,$$

где

$$\langle \xi' | \mathcal{A} | \xi \rangle = (\psi_{\xi'}^*(x), \mathcal{A} \psi_{\xi}(x))$$

— оператор \mathcal{A} в ξ -представлении. Отсюда следует, что для определения этого среднего, т. е. в принципе наблюдаемого, значения величины \mathcal{A} в случае, когда система находится в состоянии k , можно задать волновую функцию этого состояния $\Phi_k(t)$, но можно задать и связанную с этим состоянием матрицу

$$\langle \xi | \rho_k | \xi' \rangle = \Phi_k(\xi, t) \Phi_k^*(\xi', t),$$

с помощью которой интересующее нас среднее значение запишется в виде

$$\langle k | \mathcal{A} | k \rangle = \sum_{\xi \xi'} \langle \xi | \rho_k | \xi' \rangle \langle \xi' | \mathcal{A} | \xi \rangle = \sum_{\xi} \langle \xi | \rho_k \mathcal{A} | \xi \rangle = \text{Sp } \rho_k \mathcal{A}$$

(заметим, что в последней формуле операция Sp уже не связана с конкретным выбором ξ -представления). Оператор $\rho_k(t)$, матричное ξ -представление которого мы только что ввели, называется матрицей плотности чистого квантово-механического состояния k . Убедимся теперь, что относительно этого оператора можно построить замкнутый формализм, аналогичный и эквивалентный шредингеровскому для волновой функции. Для этого запишем сначала уравнение Шредингера для комплексно сопряженной волновой функции $\Phi_k^*(\xi', t)$,

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_k^*(\xi', t) = - \sum_{\xi''} \Phi_k^*(\xi'', t) \langle \xi'' | H | \xi' \rangle,$$

где мы учли условие самосопряженности оператора Гамильтона $H^+ = H$,

$$\langle \xi' | H | \xi'' \rangle^* = \langle \xi'' | H^T | \xi' \rangle^* = \langle \xi'' | H^+ | \xi' \rangle = \langle \xi'' | H | \xi' \rangle.$$

Комбинируя это уравнение с написанным ранее уравнением для $\Phi_k(\xi, t)$, получаем

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\Phi_k(\xi, t) \Phi_k^*(\xi', t)) = \sum_{\xi''} (\langle \xi | H | \xi'' \rangle \Phi_k(\xi'', t) \Phi_k^*(\xi', t) - \Phi_k(\xi, t) \Phi_k^*(\xi'', t) \langle \xi'' | H | \xi' \rangle),$$

откуда сразу следует замкнутое относительно матрицы плотности $\langle \xi | \rho_k | \xi' \rangle$ уравнение движения

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \langle \xi | \rho_k | \xi' \rangle = \langle \xi | H \rho_k - \rho_k H | \xi' \rangle,$$

которое в операторном виде можно представить как

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \rho_k = H \rho_k - \rho_k H$$

с формальным его решением в виде

$$\rho_k(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \rho_k(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} = U^+(t) \rho_k(0) U(t)$$

(во избежание недоразумений заметим, что полученное уравнение для оператора $\rho_k(t)$ является по самому построению уравнением движения в шредингеровском временном представлении).

Квантово-механические формализмы, основанные на рассмотрении волновых функций $\Phi_k(t)$ и оператора $\rho_k(t)$, естественно, эквивалентны. Мы определили оператор ρ_k с помощью функций $\Phi_k(\xi)$. Наоборот, располагая матрицей $\langle \xi | \rho_k | \xi' \rangle$, можно при желании восстановить все компоненты вектора $\Phi_k(t)$ с точностью до несущественного постоянного фазового множителя. Действительно, пусть

$$\Phi_k(\xi) = |\Phi_k(\xi)| e^{i\chi_k(\xi)}.$$

Тогда, выразив модуль функции $\Phi_k(\xi)$ через диагональный элемент матрицы ρ_k ,

$$|\Phi_k(\xi)| = \sqrt{\Phi_k(\xi) \Phi_k^*(\xi)} = \sqrt{\langle \xi | \rho_k | \xi \rangle},$$

и используя определение матрицы ρ_k , будем иметь

$$\langle \xi | \rho_k | \xi_0 \rangle = \sqrt{\langle \xi | \rho_k | \xi \rangle \langle \xi_0 | \rho_k | \xi_0 \rangle} e^{i(\chi_k(\xi) - \chi_k(\xi_0))}.$$

Выделяя из этого соотношения фазовый множитель функции $\Phi_k(\xi)$, получим для нее

$$\Phi_k(\xi) = \frac{\langle \xi | \rho_k | \xi_0 \rangle}{\sqrt{\langle \xi_0 | \rho_k | \xi_0 \rangle}} e^{i\chi_k(\xi_0)}.$$

Из свойств оператора ρ_k (которые мы более подробно и в более общем виде рассмотрим в следующем пункте) мы отметим сейчас только два. Первое относится к установлению «физического смысла» матричных элементов оператора ρ_k . Имея в виду вероятностную интерпретацию волновой функции, мы можем сказать, что его диагональные матричные элементы

$$\langle \xi | \rho_k | \xi \rangle = \Phi_k^*(\xi, t) \Phi_k(\xi, t) = W_k(\xi, t)$$

определяют квантово-механическую вероятность обнаружить у системы, находящейся в состоянии k , параметр ξ , равный выбранному значению (недиагональные

матричные элементы определяют фазовые соотношения между функциями $\Phi_k(\xi)$ с разными значениями аргументов ξ). В связи с произведенной «интерпретацией» матрицы плотности, обратим внимание еще на то, что величина $\langle \xi | \rho_k | \xi' \rangle$ определяется (в отличие от $\Phi_k(\xi, t)$) двумя независимыми наборами величин ξ . В связи с этим для матрицы плотности можно определить с помощью оператора преобразования $\langle \xi | U | \alpha \rangle$ смешанное α - ξ -представление

$$\rho_k(\alpha, \xi; t) = \Phi_k^*(\xi, t) \langle \xi | U | \alpha \rangle \Phi_k'(\alpha, t) = \sum_{\xi'} \langle \xi | U | \alpha \rangle \langle \alpha | U^+ | \xi' \rangle \langle \xi' | \rho_k | \xi \rangle,$$

которое по отношению к сверткам по величинам α и ξ ведет себя совершенно так же, как классическая функция распределения по этим величинам (это, однако, вовсе не означает, что матрица плотности в смешанном представлении $\rho_k(\alpha, \xi)$ является именно такой функцией распределения),

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \rho_k(\alpha, \xi; t) &= \sum_{\xi'} \Delta(\xi - \xi') \langle \xi' | \rho_k | \xi \rangle = \langle \xi | \rho_k | \xi \rangle = \Phi_k^*(\xi, t) \Phi_k(\xi, t) = W_k(\xi, t), \\ \sum_{\xi} \rho_k(\alpha, \xi; t) &= \sum_{\xi \xi'} \langle \alpha | U^+ | \xi' \rangle \langle \xi' | \rho_k | \xi \rangle \langle \xi | U | \alpha \rangle = \\ &= \langle \alpha | \rho_k | \alpha \rangle = (\Phi_k'(\alpha, t))^* \Phi_k'(\alpha, t) = W_k'(\alpha, t). \end{aligned}$$

Если положить, к примеру, $\alpha = p$ и $\xi = r$, то мы получим импульсно-координатное смешанное представление для матрицы плотности, введенное Вигнером (E. Wigner) в 1932 г.

Выясним, наконец, операторную природу матрицы плотности и покажем, что оператор ρ_k — это не оператор типа \mathcal{A} , U или P_{12} , а относится к классу проекционных операторов.

Предположим, что в пространстве с установленным базисом $\{\psi_\xi(x)\}$ мы имеем вектор $\Psi(\xi)$ и вектор рассматриваемого нами состояния системы $\Phi_k(\xi)$ (для простоты будем считать их нормированными на единицу). Согласно квантово-механическому принципу суперпозиции мы можем выделить из вектора Ψ «проекцию» на вектор Φ_k ,

$$\Psi = c\Phi_k + \Psi',$$

определив константу c из условия ортогональности векторов Ψ' и Φ_k , $(\Phi_k^*, \Psi') = 0$. Тогда получим, что

$$c = (\Phi_k^*, \Psi).$$

Определим теперь проекционный оператор P_{Φ_k} ,

$$P_{\Phi_k} \Psi = c\Phi_k.$$

Тогда в выбранном нами ξ -представлении имеем

$$P_{\Phi_k(\xi)} \Psi(\xi) = \sum_{\xi'} \Phi_k^*(\xi') \Psi(\xi') \Phi_k(\xi) = \sum_{\xi'} \langle \xi | \rho_k | \xi' \rangle \Psi(\xi'),$$

и мы убеждаемся, что

$$P_{\Phi_k} = \rho_k,$$

т. е. оператор ρ_k является проекционным оператором на нормированное квантово-механическое состояние Φ_k .

б) Фиксация микроскопического состояния системы как смешанного квантово-механического состояния

Рассмотренный в пункте а) способ задания микроскопического состояния, не выходящий за рамки чисто механического описания системы, не охватывает всех качеств статистической системы, исследование особенностей которой непосредственно связано с привлечением также и чисто термодинамических понятий. Об этом свидетельствует, к примеру, уже структура средних величин, которые для равновесных систем определяются с помощью какого-либо из распределений Гиббса и при расчете которых принимаются во внимание (кроме частного случая $\theta = 0$) не только все возможные стационарные состояния системы (т. е. ее механические особенности и характеристики), но также и термодинамические величины, такие как температура, химический потенциал и т. д.

В связи с этим воспользуемся тем обстоятельством, что помимо рассмотренного в п а) варианта в квантовой механике известен еще один способ фиксации микроскопического состояния системы, именно, с помощью задания состояния в виде смешанного состояния из чистых неинтерферирующих между собой квантово-механических состояний $\Psi_k(x, t)$, взятых с определенными весами w_k . Итак, задается набор чистых состояний $\{\Psi_k(x, t)\}$, в которых может находиться система, и соответствующий ему набор вероятностей $\{w_k\}$ обнаружить систему в каждом из этих чистых состояний. При этом, конечно,

$$w_k \geq 0, \quad \sum_k w_k = 1.$$

Заметим сразу, что функции $\Psi_k(x, t)$ можно сконструировать и осмыслить на основе каких-либо соображений в рамках квантовой механики (например, в стационарном случае удобно в качестве $\Psi_k(x)$ использовать собственные функции оператора Гамильтона $\psi_n(x) = |n, N\rangle$). Однако по отношению к выбору величин w_k квантовая механика никаких рецептов не дает. При решении этого вопроса существенную роль играют уже принципы статистической механики, и в частности статистические распределения Гиббса, определяющие структуру смешанного состояния макроскопической равновесной системы.

В соответствии с введенным выше способом задания микроскопического состояния, средние величины, сопоставляемые макроскопическим наблюдаемым значениям, определяются теперь как средние по распределению w_k от квантово-механических средних

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_k w_k \langle k | \mathcal{A} | k \rangle = \sum_{\xi \xi'} \sum_k w_k \Phi_k(\xi, t) \Phi_k^*(\xi', t) \langle \xi' | \mathcal{A} | \xi \rangle.$$

Определим теперь в матричном ξ -представлении оператор ρ — статистический оператор фон Неймана (J. von Neumann, 1927–1931), называемый в обиходе матрицей плотности, с помощью соотношения

$$\langle \xi | \rho | \xi' \rangle = \sum_k w_k \Phi_k(\xi, t) \Phi_k^*(\xi', t).$$

Тогда для средних величин получаем уже не зависящее от конкретного выбора ξ -представления выражение, существенно определяемое этим статистическим оператором,

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_{\xi \xi'} \langle \xi | \rho | \xi' \rangle \langle \xi' | \mathcal{A} | \xi \rangle = \sum_{\xi} \langle \xi | \rho \mathcal{A} | \xi \rangle = \text{Sp } \rho \mathcal{A}.$$

Заметим, что согласно определениям операторов ρ_k и ρ ,

$$\rho = \sum_k w_k \rho_k,$$

рассмотренный нами ранее оператор ρ_k является частным случаем введенного выше статистического оператора ρ .

Небезынтересно отметить также, что идея характеризовать состояние статистической системы в виде смешанного состояния чистых механических состояний появилась в физике еще задолго до открытия самой квантовой механики, когда «чистому» (в современной терминологии) механическому состоянию системы N частиц, определяемому набором их импульсов и координат $(p, q) = (p_1, \dots, p_N; r_1, \dots, r_N)$ (как говорят, точкой в $6N$ -мерном фазовом пространстве, см. подробнее т. 3, гл. 5, § 1), Дж. К. Максвелл (J. C. Maxwell) в 1860 г., а затем и Людвиг Больцман (L. Boltzmann) сопоставили плотность вероятности $w(p, q)$ обнаружить систему в $6N$ -мерном дифференциально малом объеме $(p, p + dp; q, q + dq)$, тем самым впервые определив структуру «смешанного» (в современной терминологии) состояния равновесной статистической системы. Естественно, что с появлением квантовой механики эта идея была перенесена в квантовую теорию и обобщена в соответствии с новым пониманием механических состояний системы.

в) Статистический оператор и его свойства

Статистический оператор ρ и величины $\text{Sp } \rho \mathcal{A}$, определяющие наблюдаемые макроскопические характеристики исследуемой системы, играют фундаментальную роль во всем формализме статистической механики, так как в отличие от квантово-механического подхода к исследованию системы это единственная из известных возможность определения микроскопических состояний и соответствующих им средних для статистических систем, принципиально находящихся в состояниях с отличной от нуля температурой.

Остановимся на некоторых общих свойствах оператора ρ .

1. Нормировка статистического оператора

Полагая $\mathcal{A} = 1$, имеем как следствие нормированности распределения w_k для любых значений t

$$\text{Sp } \rho = 1.$$

2. Энергетическое представление для равновесного случая

Положим $k = n''$ и $\xi = n$, т. е. в качестве функций Ψ_k выберем собственные функции оператора Гамильтона $\psi_{n''} = |n'', N\rangle$, а в качестве базисных функций $\psi_\xi(x)$ — функции из того же набора $\psi_n(x)$. Тогда коэффициенты разложения функции Ψ_k в этом базисе будут равны

$$\Phi_{n''}(n) = \Delta(n - n''); \quad \Phi_{n''}^*(n') = \Delta(n' - n''),$$

где $\Delta(n_1 - n_2)$ — функция Кронекера в случае дискретного спектра квантовых чисел n (точнее, произведение символов Кронекера для каждого из квантовых чисел, составляющих совокупность n , которая определяет стационарное состояние системы) или δ -функция Дирака в случае непрерывного спектра величин n . Поэтому в энергетическом представлении матрица плотности оказывается диагональной,

$$\langle n | \rho | n' \rangle = \sum_{n''} w_{n''} \Delta(n - n'') \Delta(n' - n'') = w_n \Delta(n - n').$$

Более того, для равновесных состояний статистической системы мы как бы уже заранее знаем структуру смешанного состояния, так как величины w_n определяются соответствующим гиббсовским распределением; например, в случае, когда термодинамическое состояние системы фиксируется параметрами θ, V, N , то

$$w_n(\theta, V, N) = \frac{1}{Z} e^{-E_n/\theta} = e^{(\mathcal{F}-E_n)/\theta}.$$

Заметим, что в рассматриваемом случае равновесной системы состав смешанного состояния определяется исключительно статистическими свойствами системы и является следствием тех аксиом, которые принимаются (в тех или иных вариантах) при введении канонических распределений в статистической механике (см. более подробно т. 2, гл. 1). Не повторяя здесь вывода канонического распределения и всей сопутствующей этому выводу аргументации, отметим только, что оно отражает известное положение о равновероятности микроскопических (чистых) состояний с одинаковым собственным значением E_n , которое для статистических систем, подчиненных нулевому началу термодинамики, можно подтвердить соответствующим квантово-механическим рассмотрением (см. т. 3, гл. 5, § 8), и уже упоминавшийся нами ранее обязательный для равновесных систем рассматриваемого типа принцип термодинамической аддитивности, непосредственно связанный с предельной статистической процедурой $N \rightarrow \infty$, $v = V/N = \text{const}$ (что еще раз указывает на асимптотический характер равновесных статистических распределений).

Действительно, полагая, что $w_n = w(E_n)$ и что макроскопические части равновесной системы (для простоты достаточно разделить исходную систему на две термодинамические подсистемы 1 и 2) являются тоже равновесными системами, мы можем, имея в виду предельный статистический переход (т. е. пренебрегая «поверхностными» эффектами в пользу объемных и, следовательно, энергетическими эффектами, связанными с учетом взаимодействия подсистем в соединяющей их приграничной области), написать, что

$$E_n \stackrel{\text{as}}{=} E_{n_1} + E_{n_2},$$

и поэтому, вследствие независимости термодинамических равновесных состояний каждой из подсистем не только друг от друга, но и вообще от любых других систем, находящихся с ними в состоянии термодинамического равновесия и образующих по отношению к каждой подсистеме общий термостат, будем иметь

$$w(E_{n_1} + E_{n_2}) = w(E_{n_1}) \cdot w(E_{n_2}).$$

Решая это уравнение, сразу получаем структуру зависимости функции распределения w от энергии

$$w(E_n) = C e^{-\beta E_n},$$

совпадающую по форме с выписанным нами распределением Гиббса (физический смысл величины β как обратной температуры и нормировочного коэффициента C можно установить с помощью дополнительных соображений уже чисто макроскопического характера).

Располагая полностью определенной матрицей $\langle n | \rho | n' \rangle$ в энергетическом представлении, мы можем написать и сам статистический оператор равновесной системы в виде

$$\rho(\theta, V, N) = \frac{e^{-H/\theta}}{\text{Sp } e^{-H/\theta}} = e^{(\mathcal{F}-H)/\theta},$$

где $\mathcal{F}(\theta, V, N) = -\theta \ln \text{Sp} e^{-H/\theta}$ — свободная энергия системы, равновесное состояние которой фиксируется заданием параметров θ, V, N .

Если число частиц как макроскопический параметр системы не фиксировано (система выделена из термостата лишь воображаемыми стенками, определяющими объем системы), и равновесное состояние системы определяется заданными величинами температуры, объема и химического потенциала μ , то распределение по микроскопическим состояниям системы (определяемым теперь заданием точного числа частиц N в этом объеме и набором квантовых чисел n , характеризующих стационарное состояние системы для каждого значения N) определяется так называемым большим каноническим распределением Гиббса

$$w_{Nn}(\theta, V, \mu) = \frac{1}{\zeta} e^{-(E_n - \mu N)/\theta} = e^{(\Omega - E_n + \mu N)/\theta},$$

и статистический оператор ρ в этом случае имеет вид

$$\rho(\theta, V, \mu) = \frac{e^{-(H - \mu N)/\theta}}{\text{Sp} e^{-(H - \mu N)/\theta}} = e^{(\Omega - H + \mu N)/\theta},$$

где

$$\Omega(\theta, V, \mu) = -\theta \ln \text{Sp} e^{-(H - \mu N)/\theta}$$

— термодинамический потенциал системы в переменных θ, V, μ .

3. x -представление статистического оператора системы N частиц и его свойства симметрии

Пусть $X = x_1, \dots, x_N$ — совокупность N координат или N импульсов частиц системы. Полагая $\xi = X'$, будем иметь для собственных функций «оператора» X в этом же X -представлении

$$\Psi_{X'}(X) = \Delta(X - X'),$$

где $\Delta(X - X')$, — как и ранее, символы Кронекера или функции Дирака в зависимости от дискретности или непрерывности величин X . Выбирая для определенности $k = n$, получим

$$\langle X | \rho | X' \rangle = \sum_n w_n \psi_n^*(X') \psi_n(X).$$

Эта форма записи статистического оператора с помощью N -частичных волновых функций, явно зависящих от x_1, \dots, x_N , непосредственно определяет свойства симметрии оператора ρ по отношению к перестановкам индексов частиц $1, \dots, N$. Действуя каким-либо оператором перестановки P только на нештрихованные переменные $X = x_1, \dots, x_N$ и только на штрихованные $X' = x'_1, \dots, x'_N$, будем иметь соответственно для случаев бозе-систем или ферми-систем

$$P \langle X | \rho | X' \rangle = \langle X | \rho | X' \rangle P = \begin{cases} \langle X | \rho | X' \rangle, \\ (-1)^{\lambda_P} \langle X | \rho | X' \rangle, \end{cases}$$

где λ_P обозначает четность данной перестановки P . Записывая этот результат в операторной форме, имеем

$$P\rho - \rho P = 0$$

или, учитывая, что для оператора перестановки $P^{-1} = P$,

$$P\rho P^{-1} = P\rho P = \rho,$$

т. е. одновременная одинаковая перестановка аргументов x_1, \dots, x_N и x'_1, \dots, x'_N не изменяет статистического оператора системы одинаковых частиц, в связи с чем мы часто будем писать просто $\rho(1, 2, \dots, N)$ и считать эту величину симметричной относительно любых перестановок чисел $1, 2, \dots, N$ вне зависимости от того, относится она к N -частичным бозе или ферми-системам.

4. Уравнение движения для статистического оператора $\rho(t)$

Вспоминая, что оператор ρ непосредственно выражается с помощью ρ_k как сумма $\sum w_k \rho_k$, умножим полученное в пункте а) уравнение для оператора чистого квантово-механического состояния ρ_k на вероятность w_k обнаружить систему в состоянии k и просуммируем по всем k . Если вероятности w_k не зависят от времени, то мы сразу получаем уравнение

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \rho}{\partial t} = H \rho - \rho H,$$

которое можно записать, как и использованное нами уравнение для ρ_k , в «интегральном» виде, вводя начальное значение $\rho(0)$,

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} = U^+(t) \rho(0) U(t).$$

Полученное выше общее уравнение движения для статистического оператора фон Неймана в шредингеровском временном представлении является следствием общих квантово-механических уравнений движения и самой конструкции матрицы плотности и представляет, по существу, квантовый аналог уравнения Лиувилля (в связи с чем его следовало бы называть уравнением фон Неймана—Лиувилля)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{H \rho - \rho H}{i \hbar} = \{H, \rho\}_{\text{кв}},$$

(фигурными скобками обозначены квантовые скобки Пуассона), которое при рассмотрении кинетики статистических систем играет ту же фундаментальную роль, что и классическое уравнение Лиувилля в статистической теории классических систем N тел (т. 3, гл. 5, § 1).

Сделаем несколько замечаний, связанных с полученным выше уравнением движения для статистического оператора $\rho(t)$.

Во-первых, структура смешанного состояния $\{w_k\}$ может в принципе изменяться во времени. Но так как характерные для изменений квантово-механических состояний интервалы времени (характерные периоды квантово-механических колебаний волновых функций, времена квантовых переходов и т. п.), заложенные в уравнении для оператора чистого состояния ρ_k , в масштабном отношении значительно меньше времени заметных изменений функций w_k , измеряемых уже в совсем другой, кинетической шкале времени (см., к примеру, вывод кинетического уравнения Паули в т. 3, гл. 5, § 8), то структура смешанного состояния $\{w_k\}$ если и меняется во времени, то квазистатически по отношению к упомянутым выше интервалам «квантово-механического» времени (что и позволило нам внести функцию w_k под знак производной по времени в левой части уравнения для оператора ρ , помня, что эта производная по квантово-механическому времени досталась нам в наследство от уравнения Шредингера). В дополнение к сказанному заметим еще, что, как уже упоминалось ранее, кинетические процессы в статистических системах, по принятой в классической теории традиции, в реальных вариантах теории рассматриваются в слабонеравновесном приближении, исходящем из предположения, что в локальных областях системы успевают реализоваться квазиравновесное состояние.

Во-вторых, характер изменения во времени среднего значения от логарифма статистического оператора

$$\sigma(t) = -\langle \ln \rho(t) \rangle = -\text{Sp} \{ \rho(t) \ln \rho(t) \},$$

которое весьма часто сопоставляют с энтропией неравновесной системы, может быть однозначно определен на основе использования символического решения для $\rho(t)$. Действительно,

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= -\text{Sp} \{ U^+(t) \rho(0) U(t) \ln (U^+(t) \rho(0) U(t)) \} = \\ &= -\text{Sp} \{ U^+(t) \rho(0) U(t) \cdot U^+(t) \ln \rho(0) \cdot U(t) \} = \\ &= -\text{Sp} \{ \rho(0) \ln \rho(0) \} = \sigma(0) = \text{const}. \end{aligned}$$

Этот результат не связан с выбранной конструкцией функции от ρ , стоящей под знаком Sp , так как для любой другой зависимости вследствие условия $UU^+ = I$ и свойств шпура получим тот же результат:

$$\begin{aligned} \text{Sp} \{ F(\rho(t)) \} &= \text{Sp} \left\{ \sum_n a_n \rho^n(t) \right\} = \sum_n a_n \text{Sp} \{ U^+ \rho(0) U \dots U^+ \rho(0) U \} = \\ &= \sum_n a_n \text{Sp} \{ U^+ \rho^n(0) U \} = \text{Sp} \left\{ \sum_n a_n \rho^n(0) \right\} = \text{Sp} \{ F(\rho(0)) \} = \text{const}. \end{aligned}$$

И дело здесь не в математическом фокусе, а в том, что физически осмысленное понятие энтропии (как и других термодинамических понятий, таких как температура, давление, химический потенциал и т.д.) появляется в эволюционном развитии системы лишь после завершения релаксационного процесса, связанного с появлением возможности описывать неравновесную систему не в терминах механики, а с помощью функций распределения, и с переходом к кинетической шкале времени, в масштабе которого уже происходит (в конце следующего этапа релаксационных процессов в системе) образование локальных термодинамических состояний со всеми характеризующими эти состояния термодинамическими параметрами, включая и энтропию. Так как кинетические уравнения, описывающие эволюцию статистических систем в этой шкале времени, обязаны быть уравнениями релаксационного типа, то необратимость эволюционного процесса, выраженная в форме H -теоремы или еще каким-либо образом, дает возможность определить энтропию локально-неравновесного состояния системы с временным поведением, соответствующим второй части второго начала термодинамики.

В-третьих, на основе полученного выше формального решения уравнения движения для оператора $\rho(t)$ можно переосмыслить известную классическую теорему Пуанкаре о возврате, используя уже исключительно квантовые представления о фиксации состояния системы и его эволюции. Используя энергетическое представление, получаем, что каждый матричный элемент неравновесного статистического оператора

$$\langle n | \rho(t) | n' \rangle = \langle n | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} | n' \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_{n'}) t} \langle n | \rho(0) | n' \rangle$$

воспроизводится через время $T = 2\pi\hbar / (E_n - E_{n'})$. Договариваясь о степени точности воспроизведения начального состояния системы, мы теперь уже не можем, как в классическом варианте теоремы, использовать координатно-импульсную фиксацию микроскопического состояния, но зато можем определить эту степень «точности» возвращения в исходное состояние по воспроизведению любого конечного числа s матричных элементов оператора ρ . Тогда время возврата T окажется равным наименьшему кратному всех периодов (T_1, \dots, T_s) точного воспроизведения каждой

из этих гармоник (с повышением точности воспроизведения $\rho(0)$, т. е. с ростом числа s , увеличивается и общее время возврата T).

5. Эволюция системы в гейзенберговском временном представлении

Наряду с шредингеровским формализмом в квантовой теории используется в определенном смысле альтернативное по отношению к нему гейзенберговское временное представление, согласно которому вектор состояния системы фиксирован, $\Phi_k = \Phi_k(0)$, а описание эволюции системы целиком выражается уравнениями движения для операторов динамических величин. Такое же представление можно использовать и для систем, находящихся в смешанных состояниях.

Рассмотрим среднее значение некоторой физической величины, рассчитанное с помощью введенного нами оператора $\rho(t)$,

$$A(t) = \langle \mathfrak{A} \rangle = \text{Sp } \mathfrak{A} \rho(t).$$

Выразив оператор $\rho(t)$ через его начальное значение $\rho(0)$ и произведя под знаком Sp перестановку оператора эволюции $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ с последнего места на первое, получим

$$A(t) = \text{Sp } \{ \mathfrak{A} U^+(t) \rho(0) U(t) \} = \text{Sp } \{ \mathfrak{A} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t} \} = \text{Sp } \{ \mathfrak{A}(t) \rho(0) \},$$

где зависимость оператора \mathfrak{A} от времени введена с помощью соотношения

$$\mathfrak{A}(t) = U(t) \mathfrak{A} U^+(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \mathfrak{A} e^{-\frac{i}{\hbar} H t},$$

представляющего собой гейзенберговское временное представление этого оператора.

Уравнение движения для оператора $\mathfrak{A}(t)$, выражающее теперь эволюцию статистической системы (так как матрица плотности в этом представлении фиксирована и равна $\rho(0)$), получается сразу после дифференцирования приведенного выше определения $\mathfrak{A}(t)$ по времени,

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \mathfrak{A}(t)}{\partial t} = [H, \mathfrak{A}(t)]_-.$$

Оба временных формализма, шредингеровский и гейзенберговский, конечно, эквивалентны. Выбор какого-либо одного из них для описания эволюции системы определяется главным образом соображениями удобства и целями предполагаемых исследований.

6. Представление взаимодействия для статистического оператора и динамическая теория возмущений

Рассмотренные в предыдущих пунктах 4 и 5 представления оператора ρ , имея несомненное общетеоретическое значение, в практическом отношении при необходимости проведения конкретных расчетов, связанных с определением средних значений, значительно теряют вследствие наличия в экспонентах полного гамильтониана системы, собственные функции которого, как правило, не известны, что значительно затрудняет взятие операции Sp . Выделяя в общем гамильтониане системы $H = H_0 + H_1$ гамильтониан идеальной системы H_0 , для которой, как мы уже указывали ранее, этой трудности не существует, попытаемся опустить из экспоненты гамильтониана взаимодействия частиц друг с другом H_1 на основную строку так, чтобы при этом в экспонентах остался бы только оператор H_0 , что позволило бы проводить необходимые усреднения уже с помощью статистического оператора идеальной системы.

Осуществление этой программы означало бы построение динамической теории возмущений для статистического оператора $\rho(t)$ в форме разложения по степеням

того параметра, который, присутствуя в H_1 , характеризует интенсивность взаимодействия частиц системы друг с другом. Эта проблема в квантовой механике по отношению к волновой функции системы давно решена, и нам остается только переформулировать известную квантово-механическую процедуру применительно к рассматриваемому в статистической теории оператору $\rho(t)$.

Выделим в операторе $\rho(t)$ ту часть, которая определяет эволюцию статистического оператора идеальной системы,

$$\rho_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \rho_0(0) e^{\frac{i}{\hbar}H_0t},$$

и которая по отношению к $\rho(t)$ является предельной в случае $H_1 \rightarrow 0$. При включении взаимодействия эта формула изменится, и это изменение мы представим в виде

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \rho_I(t) e^{\frac{i}{\hbar}H_0t},$$

сохранив управляющие эволюцией идеальной системы экспоненциальные операторы $U_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t}$ и $U_0^+(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$, а учет влияния гамильтониана взаимодействия H_1 на эволюцию всей системы возложив на внутреннюю часть статистического оператора $\rho(t)$, которую и будем называть статистическим оператором в представлении взаимодействия $\rho_I(t)$.

Тогда для этого оператора будем иметь

$$\rho_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \rho(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar}Ht} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} = S(t) \rho(0) S^+(t),$$

где оператор эволюции статистического оператора в представлении взаимодействия имеет вид

$$S(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}.$$

Записывая среднее значение динамической величины \mathfrak{A} в варианте представления взаимодействия, имеем

$$A(t) = \text{Sp} \{ \mathfrak{A} \rho(t) \} = \text{Sp} \{ e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \mathfrak{A} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \rho_I(t) \} = \text{Sp} \{ \mathfrak{A}_I(t) \rho_I(t) \},$$

где оператор динамической величины \mathfrak{A} в представлении взаимодействия определен как

$$\mathfrak{A}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \mathfrak{A} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t},$$

и мы еще раз убеждаемся, что это среднее определяется операцией $\text{Sp} \mathfrak{A} \rho$ в любых из упомянутых нами временных представлениях.

Заметим, что в рассматриваемом варианте и статистический оператор $\rho_I(t)$, и оператор динамической величины $\mathfrak{A}_I(t)$ зависят от времени, поэтому эволюция системы будет характеризоваться уже двумя уравнениями движения. Уравнение для оператора $\mathfrak{A}_I(t)$ по форме совпадает с уравнением движения оператора \mathfrak{A} в гейзенберговском представлении в случае $H_1 = 0$, а уравнение для $\rho_I(t)$, которое легко получить, продифференцировав по времени формулу, определяющую этот оператор, по форме напоминает уравнение движения полного статистического оператора в шредингеровском представлении,

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \mathfrak{A}_I(t) = [H_0, \mathfrak{A}_I(t)]_-, \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \rho_I(t) = [H_1(t)_I, \rho_I(t)]_-.$$

Обратимся теперь к оператору эволюции в представлении взаимодействия

$$S(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0+H_1)t}.$$

Дифференцируя его по времени, имеем

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} S(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} (-H_0 + H_0 + H_1) e^{-\frac{i}{\hbar} (H_0 + H_1) t} = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} H_1 e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 t}$$

или окончательно

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} S(t) = H_1(t)_I S(t),$$

где $H_1(t)_I$ — оператор взаимодействия частиц друг с другом в представлении взаимодействия.

В связи с полученным дифференциальным уравнением для оператора эволюции $S(t)$ сразу же возникает вопрос о дополнительном условии, определяющем единственность его физически осмысленного решения. Заимствуя идею такого дополнительного «граничного» (или «начального») значения для оператора $S(t)$ из подкрепленной многими авторитетами теории рассеяния, будем полагать, что на временах $t \rightarrow -\infty$ (т. е. как бы до того, как система стала характеризоваться полным гамильтонианом $H = H_0 + H_1$) взаимодействия частиц не было, т. е.

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} S(t) = 1.$$

При этом мы, конечно, должны понимать, что эта процедура связана с введением в оператор H_1 фактора адиабатического включения взаимодействия частиц, например, в простейшей экспоненциальной форме

$$H_1 \rightarrow H_1 e^{\epsilon t} \Big|_{\epsilon > 0, \epsilon \rightarrow 0},$$

что при дальнейших исследованиях приводит к появлению характерных для теории рассеяния запаздывающих конструкций.

Желая превратить исходную формулу оператора $S(t)$ в ряд по степеням H_1 , мы можем использовать для этой цели полученное дифференциальное уравнение, представив искомую величину в виде разложения

$$S(t) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(t)$$

и решая это уравнение методом последовательных итераций. Имеем

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} S_n(t) = H_1(t)_I S_{n-1}(t), \quad n = 1, 2, 3, \dots; \quad S_0(t) = 1,$$

откуда после взятия интегралов в каждом из следующих за первым приближений находим, что

$$\begin{aligned} S(t) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^t d\tau_1 \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{-\infty}^{\tau_{n-1}} d\tau_n H_1(\tau_1)_I H_1(\tau_2)_I \dots H_1(\tau_n)_I = \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^t d\tau_1 \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{-\infty}^{\tau_{n-1}} d\tau_n T(H_1(\tau_1)_I H_1(\tau_2)_I \dots H_1(\tau_n)_I), \end{aligned}$$

где операция хронологизации T определяет исходное расположение временных аргументов $\tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_n$ под знаком n -кратного интеграла по интервалам

$-\infty < \tau_i \leq t$. Последнюю формулу обычно записывают более компактно, вводя символическую T -экспоненту,

$$S(t) = T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t H_1(\tau)_I d\tau \right\}.$$

Сделаем несколько замечаний по поводу достигнутых результатов.

Во-первых, полученное решение для оператора эволюции системы является вариантом динамической теории возмущений, представленной в форме, позволяющей исследовать временные процессы, происходящие в системе, до любого порядка по константе взаимодействия, входящей в оператор H_1 . Как следует из представленного выше рассмотрения, исходящего из уравнения движения квантово-механической системы (в шредингеровской или какой-либо другой форме), оператор $S(t)$ описывает эволюцию системы в механической шкале времени, тогда как для реального описания кинетики статистической системы в терминах не квантовых состояний, а функций распределения необходимо использовать другую, кинетическую шкалу времени, которая в полученном решении даже не намечена.

Во-вторых, полученный результат для оператора $S(t)$ должен еще в сочетании с другими операторами усредняться, причем, изгнав оператор H_1 из экспонент, мы можем с удобством использовать при расчете шпуров собственные функции идеальной системы, представляемые, как правило, в виде соответствующего произведения плоских волн. Это удобно, но получающиеся средние оказываются многовременными, что требует развития соответствующей техники, например использования многовременных функций Грина и т. п.

В-третьих, граничное условие $H_1|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow 0$, взято напрокат из квантовой теории рассеяния, где оно вполне соответствует физической ситуации, когда на $t \rightarrow -\infty$ частицы пространственно разведены и, нацелившись друг на друга, еще не взаимодействуют. Для систем N частиц подобная интерпретация курьезна. Более того, если мы, к примеру, возьмем кристалл и начнем адиабатически выключать взаимодействие частиц H_1 , то, начиная с некоторого значения константы взаимодействия, кристаллическая решетка распадется, образуя газ, который далее при $H_1 \rightarrow 0$ превратится в идеальный. Обратный процесс адиабатического включения H_1 в лучшем случае приведет к состоянию перенасыщенного пара, но никак не пространственно организованного твердого тела. Таким образом, изложенная выше динамическая теория возмущений в целом может быть гарантированно использована лишь для исследования начальных (докинетических) этапов эволюции неидеальных однофазных систем.

7. Уравнение Блоха для равновесной матрицы плотности и термодинамическая теория возмущений

Рассмотрим равновесную статистическую систему и выделим операторную часть равновесной матрицы плотности

$$\tilde{\rho} = e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad \rho = \frac{\tilde{\rho}}{\text{Sp } \tilde{\rho}},$$

где $\beta = 1/\theta$, а оператор \mathcal{H} равен либо оператору Гамильтона H в случае, когда используется каноническое распределение Гиббса, либо оператору $H - \mu N$, характеризующему большое каноническое распределение Гиббса. Дифференцируя этот оператор по обратной температуре β , получим так называемое уравнение Блоха (F. Bloch, 1932)

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \beta} = -\mathcal{H} \tilde{\rho},$$

которое с чисто формальной точки зрения можно сопоставить с уравнением Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi,$$

если только в уравнении Блоха сделать замену $\rho \rightarrow \psi$, $\mathcal{H} \rightarrow H$ и $\beta \rightarrow it/\hbar$, не придавая ей какого-либо физического значения.

Игнорируя эту бессмысленность, мы между тем можем воспользоваться указанной внешней аналогией для того, чтобы перенести развитую в предыдущем пункте 6 методику разложения S -матрицы в соответственно модифицированном виде на равновесный статистический оператор $\tilde{\rho}$, с тем чтобы она стала основой для разработки термодинамической теории возмущений в равновесной статистической теории неидеальных квантовых систем.

Полагая $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + H_1$, где \mathcal{H}_0 — гамильтониан H_0 или оператор $H_0 - \mu N$ идеальной системы, и сохраняя в экспоненте только \mathcal{H}_0 , представим оператор $\tilde{\rho}$ в виде

$$\tilde{\rho} = e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + H_1)} = e^{-\beta\mathcal{H}_0} \cdot S(\beta).$$

Дифференцируя введенный выше оператор

$$S(\beta) = e^{\beta\mathcal{H}_0} \cdot e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + H_1)}$$

по обратной температуре β ,

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = e^{\beta\mathcal{H}_0} (\mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_0 - H_1) e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + H_1)} = -e^{\beta\mathcal{H}_0} H_1 e^{-\beta\mathcal{H}_0} \cdot e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\mathcal{H}},$$

и вводя аналог представления взаимодействия для оператора H_1 ,

$$H_1(\beta) = e^{\beta\mathcal{H}_0} H_1 e^{-\beta\mathcal{H}_0},$$

получаем дифференциальное уравнение для S -оператора с вытекающим из самого его определения «начальным» условием

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = -H_1(\beta) S(\beta); \quad S(0) = 1.$$

Представляя решение этого уравнения в виде бесконечного ряда по степеням H_1 ,

$$S(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(\beta); \quad S_0(\beta) = e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta\mathcal{H}_0} = 1,$$

получаем связь последовательных порядков этого разложения

$$\frac{\partial S_n(\beta)}{\partial \beta} = -H_1(\beta) S_{n-1}(\beta); \quad S_n(\beta) = (-1) \int_0^{\beta} H_1(\tau) S_{n-1}(\tau) d\tau,$$

откуда, производя последовательные итерации, получаем

$$S(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) \dots H_1(\tau_n)$$

или, учитывая упорядоченное расположение переменных интегрирования,

$$S(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T(H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n)) = T \exp \left\{ - \int_0^{\beta} H_1(\tau) d\tau \right\},$$

где символом T обозначена процедура упорядочения переменных интегрирования $\tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_n$, а символическая T -экспонента введена ради компактного обозначения всего бесконечного ряда по степеням интенсивности взаимодействия частиц друг с другом. Таким образом, разложение по этому параметру для операторной части равновесной матрицы плотности приобретает вид

$$\tilde{\rho}(\beta) = e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + H_1)} = e^{-\beta\mathcal{H}_0} T \exp \left\{ - \int_0^{\beta} H_1(\tau) d\tau \right\}.$$

Термодинамический потенциал, определяемый соотношением

$$\Omega = -\theta \ln \text{Sp } \tilde{\rho},$$

теперь тоже может быть представлен в виде разложения по средним значениям от произведений операторов $H_1(\tau)$, вычисляемых по состояниям идеальной системы с помощью оператора $\rho_0(\beta) = e^{-\beta\mathcal{H}_0}$,

$$\Omega = -\theta \ln \left[\left(\frac{\text{Sp } e^{-\beta\mathcal{H}_0} S(\beta)}{\text{Sp } e^{-\beta\mathcal{H}_0}} \right) \cdot \text{Sp } e^{-\beta\mathcal{H}_0} \right] = \Omega_0 - \theta \ln \left\langle T \exp \left\{ - \int_0^{\beta} H_1(\tau) d\tau \right\} \right\rangle_0,$$

где $\Omega_0 = -\theta \ln \text{Sp } e^{-\beta\mathcal{H}_0}$ — термодинамический потенциал идеального газа, а индекс «0» у угловых скобок означает, что среднее значение берется с помощью оператора $\rho_0(\beta)$. Окончательный вид разложения термодинамического потенциала Ω по степеням интенсивности взаимодействия частиц друг с другом (уже без логарифма от ряда для оператора $S(\beta)$) мы отложим до § 3, п. н), в котором укажем на рациональный способ расчета средних значений от произведений операторов динамических величин по состояниям равновесной идеальной системы.

8. Статистический оператор в смешанном представлении и функции распределения по микроскопическим параметрам

Располагая оператором ρ , совершенно так же, как при рассмотрении чистых состояний системы, мы можем непосредственно определить функцию распределения вероятности обнаружить у системы, находящейся в рассматриваемом смешанном состоянии, параметр (или совокупность параметров) ξ , равный выбранному значению, как

$$W(\xi) = \sum_k w_k W_k(\xi) = \sum_k w_k \Phi_k^*(\xi) \Phi_k(\xi) = \langle \xi | \rho | \xi \rangle.$$

Таким образом, диагональные матричные элементы оператора ρ в каком-либо ξ -представлении определяют функцию распределения по этой величине.

Далее, с помощью оператора преобразования U от ξ -представления к какому-либо другому α -представлению мы можем сконструировать также смешанное α - ξ -представление статистического оператора,

$$\rho(\alpha, \xi) = \sum_k w_k \Phi_k^*(\xi) \langle \xi | U | \alpha \rangle \Phi_k'(\alpha) = \sum_k w_k \rho_k(\alpha, \xi) = \sum_{\xi'} \langle \xi | U | \alpha \rangle \langle \alpha | U^+ | \xi' \rangle \langle \xi' | \rho | \xi \rangle,$$

свертка которого только по α или только по ξ дает распределение по величинам ξ или α ,

$$\sum_{\alpha} \rho(\alpha, \xi) = \sum_k w_k \Phi_k^*(\xi) \Phi_k(\xi) = W(\xi),$$

$$\sum_{\xi} \rho(\alpha, \xi) = \sum_k w_k \Phi_k'^*(\alpha) \Phi_k'(\alpha) = W'(\alpha).$$

В частности, эти формулы используются для введения координатно-импульсного представления для матрицы плотности, предложенного Вигнером (E. Wigner, 1932), в рамках которого, используя квазиклассическое приближение, можно произвести предельный переход к случаю классической статистической системы.

9. Вигнеровское представление статистического оператора и квазиклассический предельный переход

Чтобы не перегружать изложение громоздкими выражениями с многими индексами и суммированиями, остановимся на идейной стороне указанной выше процедуры, максимально упростив ее формальную часть. Для этого достаточно положить $N = 1$, освободив себя тем самым от процедур симметризации функций состояния, и считать $\xi = \mathbf{r}$, $\alpha = \mathbf{p}$ (или наоборот), игнорируя спиновые индексы.

Тогда, учитывая, что в координатном представлении ($x = \mathbf{r}'$) собственные функции операторов \mathbf{r} и \mathbf{p} имеют вид

$$\psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'); \quad \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}'},$$

а при желании использовать импульсное представление, когда $\xi = \mathbf{p}$, $\alpha = \mathbf{r}$ и $x = \mathbf{p}'$, мы должны использовать для собственных функций \mathbf{r} и \mathbf{p} выражения

$$\psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}}; \quad \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}') = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

для оператора преобразования от ξ -представления к α -представлению

$$\langle \xi | U | \alpha \rangle = (\psi_{\xi}^*(x), \psi_{\alpha}(x))$$

будем иметь на основе любого из приведенных выше вариантов

$$\langle \mathbf{r} | U | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}; \quad \langle \mathbf{p} | U^+ | \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}'}$$

Чтобы в конце выкладок не исключать несущественных в данном рассмотрении фазовых множителей, введем вместо переменных \mathbf{r} и \mathbf{r}' их естественные комбинации \mathbf{R} и $\tilde{\mathbf{r}}$,

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}, \quad \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}' + \mathbf{r}); \quad \mathbf{r}' = \mathbf{R} + \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{R} - \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{r}}; \quad \frac{\mathcal{D}(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}})}{\mathcal{D}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} = 1,$$

и в связи с этим рассмотрим не формальное следствие определения смешанного представления, данного в предыдущем пункте

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle d\mathbf{r}',$$

а его вариант в этих сдвинутых координатных переменных

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \left\langle \mathbf{R} + \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{r}} \left| \rho \right| \mathbf{R} - \frac{1}{2}\tilde{\mathbf{r}} \right\rangle e^{-i\mathbf{p}\tilde{\mathbf{r}}} d\tilde{\mathbf{r}}.$$

Аналогично, используя импульсное представление, получим для этой же величины

$$\rho(\mathbf{P}, \mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \left\langle \mathbf{P} - \frac{1}{2}\mathbf{q} \left| \rho \right| \mathbf{P} + \frac{1}{2}\mathbf{q} \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}\mathbf{q}} d\mathbf{q},$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$, $\mathbf{P} = \frac{1}{2}(\mathbf{p} + \mathbf{p}')$ и где под знаком интеграла стоит уже импульсное представление матрицы плотности.

Убедимся теперь, что именно приведенный выше вариант вигнеровского представления приводит в квазистатистическом пределе к традиционной форме уравнений движения для классических функций распределения по координатам и импульсам частиц системы.

Используя для этого рассматриваемый нами упрощенный случай $N = 1$, выберем в качестве отправного момента из приведенных выше двух вариантов координатное представление матрицы плотности и, полагая гамильтониан частицы во внешнем поле равным

$$H(\mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + U(\mathbf{r}),$$

пересчитаем прежде всего правую часть ее уравнения движения

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} (H(\mathbf{r}') - H(\mathbf{r})) \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \right) \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle + \frac{1}{i\hbar} (U(\mathbf{r}') - U(\mathbf{r})) \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle \end{aligned}$$

к переменным \mathbf{R} и $\tilde{\mathbf{r}}$. Имеем,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \cdot \frac{1}{2} - \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{r}}} \right) = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\mathbf{r}}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R} \partial \tilde{\mathbf{r}}}, \\ \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \cdot \frac{1}{2} + \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{r}}} \right) = \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\mathbf{r}}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R} \partial \tilde{\mathbf{r}}}, \end{aligned}$$

откуда для разности лапласианов получаем

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} = 2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R} \partial \tilde{\mathbf{r}}}.$$

Далее, разлагая в ряд по $(\mathbf{r}' - \mathbf{r})/2 = \tilde{\mathbf{r}}/2$ разность потенциальных энергий, получаем

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}') - U(\mathbf{r}) &= U\left(\mathbf{R} + \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2}\right) - U\left(\mathbf{R} - \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2}\right) = \\ &= \sum_{nmk} \frac{1}{n!m!k!} \frac{2}{2^n 2^m 2^k} \frac{\partial^{n+m+k} U(\mathbf{R})}{\partial X^n \partial Y^m \partial Z^k} \tilde{x}^n \tilde{y}^m \tilde{z}^k, \end{aligned}$$

$(n+m+k=1,3,5\dots)$

где мы обозначили большими буквами компоненты вектора $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$, а буквами с волной — компоненты вектора $\tilde{\mathbf{r}} = (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$.

Умножим теперь исходное уравнение движения на $(2\pi\hbar)^{-3} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\tilde{\mathbf{r}}}$ и проинтегрируем почленно по $\tilde{\mathbf{r}}$. Тогда слева появится производная по времени от оператора $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{R})$,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle \mapsto \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{R}).$$

Первое слагаемое правой части уравнения преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \right) \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle &\mapsto \\ &\mapsto -\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \int e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \tilde{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{r}}} \left\langle \mathbf{R} + \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2} \left| \rho \right| \mathbf{R} - \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2} \right\rangle d\tilde{\mathbf{r}} = \\ &= -\frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \left\langle \mathbf{R} + \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2} \left| \rho \right| \mathbf{R} - \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2} \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \tilde{\mathbf{r}}} d\tilde{\mathbf{r}} = -\frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{R}) \end{aligned}$$

(при взятии первого интеграла по частям мы учли, что дифференцирование экспоненты по $\tilde{\mathbf{r}}$ приводит к появлению множителя $i\mathbf{p}/\hbar$).

Выделяя во втором члене первой части уравнения для $\langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle$ в тройной сумме слагаемые с $n+m+k=1$ (т. е. комбинации 100, 010 и 001, определяющие компоненты градиента потенциала внешнего поля $U(\mathbf{R})$) и замечая, что умножение экспоненты $e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \tilde{\mathbf{r}}}$ на \tilde{r}_α , где $\alpha = x, y, z$, эквивалентно действию на нее дифференциального оператора $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_\alpha}$, который можно сразу вынести за знак интеграла по $d\tilde{\mathbf{r}}$, получаем,

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} (U(\mathbf{r}') - U(\mathbf{r})) \langle \mathbf{r}' | \rho | \mathbf{r} \rangle &\mapsto \frac{\partial U(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial \rho(\mathbf{p}, \mathbf{R})}{\partial \mathbf{p}} + \\ &+ \sum_{\substack{n,m,k \\ (n+m+k=3,5,\dots)}} \frac{1}{n!m!k!} \left(\frac{i\hbar}{2} \right)^{n+m+k-1} \cdot \frac{\partial^{n+m+k} U(\mathbf{R})}{\partial X^n \partial Y^m \partial Z^k} \frac{\partial^{n+m+k} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{R})}{\partial p_x^n \partial p_y^m \partial p_z^k}. \end{aligned}$$

Заметим сразу, что в оставшейся тройной сумме разложение начинается с членов, пропорциональных \hbar^2 и содержащих соответствующие производные потенциала $U(\mathbf{R})$. При условии квазиклассичности внешнего воздействия на систему, когда градиенты потенциала $U(\mathbf{R})$ малы в квантово-механическом смысле (т. е. изменения потенциала $U(\mathbf{R})$ малы на длине волны де Бройля), эти члены можно отнести к квантовым поправкам. Не выписывая их снова и замечая, что

$$\frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}; \quad \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}},$$

получаем, собрав все части уравнения для смешанного представления матрицы плотности,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{p}, \mathbf{R})}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{R}} + O(\hbar^2) = \{H, \rho\}_{\text{кл}} + O(\hbar^2),$$

т. е. классическое уравнение Лиувилля как предел квазиклассического приближения для квантового уравнения движения фон Неймана.

Теперь выясним, что должно измениться в изложенной процедуре при рассмотрении смешанного представления матрицы плотности для системы многих частиц. Прежде всего, увеличится число исходных аргументов и, соответственно, число переменных \mathbf{R}_i и $\tilde{\mathbf{r}}_i$, а в определении смешанного представления для оператора ρ увеличится число экспонент $e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_i \tilde{\mathbf{r}}_i}$ и число интегралов по $d\tilde{\mathbf{r}}_i$. Новый же элемент во всем рассмотрении будет связан с появлением в гамильтониане потенциала взаимодействия частиц друг с другом $\Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$. Рассмотрим эту ситуацию, положив

для простоты $N = 2$. Тогда имеем

$$\begin{aligned} \Phi(|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_2'|) - \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) &= \Phi\left(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 + \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1 - \tilde{\mathbf{r}}_2}{2}\right) - \Phi\left(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 - \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1 - \tilde{\mathbf{r}}_2}{2}\right) = \\ &= \frac{\partial\Phi(\mathbf{R}_{12})}{\partial\mathbf{R}_{12}}(\tilde{\mathbf{r}}_1 - \tilde{\mathbf{r}}_2) + \sum_{\alpha\beta\gamma} \frac{1}{2^2} \frac{\partial^3\Phi(\mathbf{R}_{12})}{\partial R_{12}^{(\alpha)} \partial R_{12}^{(\beta)} \partial R_{12}^{(\gamma)}} \tilde{r}_{12}^{(\alpha)} \tilde{r}_{12}^{(\beta)} \tilde{r}_{12}^{(\gamma)} + \dots, \end{aligned}$$

где мы обозначили $\mathbf{R}_{12} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$, $\tilde{\mathbf{r}}_{12} = \tilde{\mathbf{r}}_1 - \tilde{\mathbf{r}}_2$, а индексы α , β и γ пробегает по три значения x, y, z . Выписывая только нулевое приближение по постоянной Планка и производя в двойном интеграле по $d\tilde{\mathbf{r}}_1 d\tilde{\mathbf{r}}_2$ замену

$$\tilde{\mathbf{r}}_1 - \tilde{\mathbf{r}}_2 \mapsto -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2},$$

а также учитывая, что

$$\frac{\partial\Phi(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|)}{\partial(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)} = \frac{\partial\Phi_{12}}{\partial\mathbf{R}_1} = -\frac{\partial\Phi_{12}}{\partial\mathbf{R}_2},$$

получаем необходимые для полного формирования классических скобок Пуассона в уравнении движения для матрицы плотности системы двух частиц дополнительные члены

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \frac{\partial\Phi(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|)}{\partial(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2)} \int \left\langle \mathbf{R}_1 + \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1}{2}, \mathbf{R}_2 + \frac{\tilde{\mathbf{r}}_2}{2} \middle| \rho \middle| \mathbf{R}_1 - \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1}{2}, \mathbf{R}_2 - \frac{\tilde{\mathbf{r}}_2}{2} \right\rangle \times \\ \times \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1\tilde{\mathbf{r}}_1 + \mathbf{p}_2\tilde{\mathbf{r}}_2)} d\tilde{\mathbf{r}}_1 d\tilde{\mathbf{r}}_2 = \\ = \frac{\partial\Phi_{12}}{\partial\mathbf{R}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \rho(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) + \frac{\partial\Phi_{12}}{\partial\mathbf{R}_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \rho(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2). \end{aligned}$$

В отношении квантовых поправок к классическому уравнению Лиувилля следует заметить, что, во-первых, они имеют гарантированный физический смысл лишь при условии квазиклассичности не только потенциала внешнего поля U , но и потенциала взаимодействия частиц друг с другом $\Phi(\mathbf{R})$ (т. е. когда градиенты потенциала $\Phi(\mathbf{R})$ не только существуют, но и малы в квантово-механическом смысле), и, во-вторых, в приведенном нами «разложении» по четным степеням постоянной Планка реальное значение имеет только первый ее член, пропорциональный \hbar^2 , так как учет тождественности частиц квантовой системы, как было выяснено в т. 2, гл. 2, § 2, дает квантовую поправку к классическому результату, пропорциональную \hbar^3 (т. е. предшествующую второй динамической поправке, которая пропорциональна \hbar^4 и которая тем самым становится негарантированной).

Заметим в конце, что интегральное представление для $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{R})$ в случае $N = 1$ позволяет непосредственно определить квантовую поправку к распределению Максвелла—Больцмана для равновесного идеального газа. Распутывая экспоненциальный оператор $\rho = C e^{-\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \beta U(\mathbf{r})}$ в первом приближении по \hbar^2 , получим после расчета матричного элемента по плоским волнам и взятия интеграла по $d\tilde{\mathbf{r}}$

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = C e^{-\beta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r})\right)} \left[1 + \frac{\hbar^2}{24m} \left(-3\beta^2 \frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{R}^2} + \beta^3 \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2 U}{\partial R_\alpha \partial R_\beta} \cdot \frac{p_\alpha p_\beta}{m} + \beta^3 \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \right) \right].$$

Хотя эта громоздкая формула нам и не понадобится, она представляет интерес с точки зрения конструкции поправочного члена.

§ 3. Представление вторичного квантования

При рассмотрении квантовых систем, состоящих из одинаковых частиц, построение волновых функций с определенными свойствами симметрии по отношению к перестановкам индексов частиц оказывается совершенно необходимым начальным этапом всего дальнейшего рассмотрения. И если в таких традиционных квантово-механических задачах, как проблема атома гелия с двумя электронами в оболочке или исследование природы межатомной связи в молекуле водорода, проблема построения волновых функций нулевого приближения решается с помощью соответствующей композиции функций одноэлектронных состояний, то при рассмотрении статистических систем, когда число одинаковых частиц N соизмеримо с числом Авогадро, реализация подобной процедуры становится технически достаточно сложной.

Наиболее естественный выход из создавшегося положения, эффективно преодолевающий эти чисто технические трудности, связан с использованием представления вторичного квантования, которое исторически было первоначально разработано и оказалось весьма продуктивным применительно к динамическим задачам квантовой теории поля, а затем уже «естественным образом» оказалось привнесенным в аппарат статистической физики равновесных (или слабонерасбалансированных) квантовых систем.

Несмотря на существенное различие квантово-полевых систем (квантующиеся свободные поля которых, как правило, подчинены релятивистским уравнениям движения) и рассматриваемых нами статистических систем, состоящих из фиксированного числа частиц (каждая из которых — это, как правило, не материальная точка и не квант поля, а целый атом или даже молекула, т. е. уже достаточно сложная квантово-механическая система нескольких тел),двигающихся по законам нерелятивистской квантовой механики, между этими разделами теоретической физики вследствие использования одинакового по своему содержанию формализма вторичного квантования естественно возникают достаточно тесные аналогии, заимствования представлений и интерпретаций и даже откровенные пересечения (например, при рассмотрении взаимодействия статистических систем с квантующимся электромагнитным излучением).

И, наконец, введение представления вторичного квантования в задачах квантовой статистики обычно производится на уровне построения N -частичного базиса с определенными свойствами симметрии (бозевскими или фермиевскими в зависимости от предполагаемых в дальнейшем исследований), т. е. в постановочной части рассматриваемых проблем еще до конкретной фиксации динамической структуры исследуемой системы (до фиксации конкретного вида гамильтониана, т. е. до микроскопического задания системы N одинаковых частиц). Таким образом, кинематические особенности многотельной системы оказываются фиксированными заранее в достаточно универсальном варианте, и уже далее при теоретическом рассмотрении каких-либо интересующих нас макроскопических проявлений тех свойств системы, которые непосредственно связаны с наличием динамического взаимодействия частиц системы друг с другом или иными полями, эта «квантовая кинематика» учитывается автоматически (мы будем полагать, что теория идеальных квантовых газов, т. е. квантовых систем одинаковых частиц без динамического взаимодействия их друг с другом, нами полностью освоена; для этого нам не потребовалось даже использовать вводимое здесь нами представление вторичного квантования (см. т. 2)).

В дальнейшем изложении мы будем придерживаться того плана введения представления вторичного квантования, который был предложен академиком Н. Н. Боголюбовым в его известных «Лекциях по квантовой статистике» (Киев, 1959), как наиболее адекватного проблематике именно квантовой статистики, а не вариантов П. Дирака, П. Йордана, П. Вигнера и В. Фока 1927 г. – 1930-х гг., более всего и непосредственно связанных с проблемами квантования полевых моделей вещества. При этом мы будем, сокращая некоторые несложные выкладки, останавливаться в основном на смысловых моментах этой процедуры, ограничиваясь рассмотрением только тех простейших операторных конструкций, которые будут необходимы в дальнейших исследованиях неидеальных квантовых систем.

Нам предстоит, во-первых, ввести базис $\{\psi_\xi(X)\}$ с соответствующими свойствами симметрии составляющих его функций $\psi_\xi(x_1, \dots, x_N)$ относительно перестановок индексов частиц, в котором будут представляться как волновые функции состояния системы, так и характеризующие ее операторы. При этом окажется, что в качестве величин ξ естественно выбрать (как и в теории идеальных квантовых газов) набор чисел заполнения $\{\dots N_f \dots\}$, подчиненный условию N -частичности системы

$$\sum_f N_f = N.$$

Во-вторых, перейдя в соответствии с общими правилами квантовой механики к соответствующему этому базису матричному представлению для операторов динамических величин $(\dots N_f \dots |F| \dots N'_f \dots)$, которое в представлении чисел заполнения в общем случае оказывается недиагональным, мы выделим в них специфические и универсальные для всех операторов каждого из рассматриваемых типов динамической аддитивности части, соответствующие операторам изменения только на единицу одного из чисел заполнения N_f с одновременным компенсирующим и сохраняющим общее требование N -частичности изменением числа $N_{f'}$ из того же их набора.

Наконец, в-третьих, мы введем операторы, изменяющие только на единицу значение какого-либо одного числа заполнения N_f , традиционно называемые операторами рождения и уничтожения и строго подчиненные определенной алгебре перестановочных соотношений, и выразим с помощью их композиций интересующие нас операторы динамических величин N -частичной системы данного статистического класса. В этой же манере, естественно, могут быть представлены и компоненты вектора состояния рассматриваемой системы.

а) Построение N -частичного базиса

Введение базисной системы функций $\{\psi_\xi(X)\}$ является не только начальным моментом исследования квантово-механических систем, но и служит основой для интерпретации получаемых в результате этого исследования результатов. Если рассматриваемая нами система характеризуется гамильтонианом H и в качестве базисных функций выбраны в принципе существующие собственные функции этого оператора, $H\psi_n = E_n\psi_n$, то вся система в генерируемом этим базисом представлении представляла бы собой идеальный газ собственных состояний (волн, собственных колебаний или возбуждений какой-либо иной структуры), характеризующихся функциями ψ_n , и все проблемы, связанные с исследованием этой системы, были бы решены. Однако уравнения Шредингера для физически интересных случаев, как правило, точно не решаются: более или менее реалистичные гамильтонианы, учитывающие то взаимодействие частиц системы, которое связано с какими-либо интересующими нас макроскопическими особенностями системы, не приводятся к диагональной

форме, характерной для идеальных квантовых систем (свойства которых, как уже упоминалось выше, мы полагаем полностью изученными). Таким образом, проблема построения базиса в нашем случае оказывается достаточно актуальной.

Следует напомнить, что так как в задачах статистической физики основные результаты выражаются через средние значения по смешанному состоянию, а величины, выражающиеся с помощью операций «взятия шпура» и определяющие эти средние, не зависят от используемых представлений, в которых рассчитываются шпуры, то в выборе базиса возникает известный произвол, который и следует использовать при разумном его построении. И здесь необходимо отметить по крайней мере несколько важных моментов.

Во-первых, неоднозначность выбора базиса (при обязательном условии его N -частичности и свойств симметрии составляющих его функций) приводит к возможности существования различных квантово-механических представлений и, следовательно, различных физических интерпретаций фигурирующих в теории величин (например, одна и та же функция состояния системы в различных базисах представляется в виде суперпозиций различных по физическому смыслу базисных векторов и т. п.).

Во-вторых, базис — это не просто теоретически построенная полная система ортонормированных в нашем случае N -частичных функций с заданными свойствами симметрии. Чтобы этот базис эффективно «работал», каждая из этих функций должна иметь известную и достаточно простую аналитическую структуру, позволяющую провести до конца все математические операции, связанные с матричным представлением операторов, определением компонент векторов состояний и т. д. Это обстоятельство, по существу, вынуждает нас использовать в качестве «строительного» материала для такого базиса известные и достаточно простые решения одночастичных задач нерелятивистской квантовой механики, из которых уже можно составлять необходимые нам N -частичные композиции, определяющие не только необходимый нам базис, но и конкретное квантово-механическое представление.

В-третьих, чтобы коэффициенты разложения по такому (являющемуся, как мы отметили выше, совокупностью собственных функций идеальной N -частичной системы) базису величин исследуемой неидеальной системы не были бы слишком громоздкими (т. е. хотя бы не сложнее разложений сферических волн по плоским) или даже физически неинтерпретируемыми, его выбор по возможности должен быть приближен к характерным особенностям исследуемой системы. Например, рассматривая газ электронов в поле точечного N -кратного положительного заряда, в качестве строительного материала базиса целесообразно использовать известные водородоподобные функции; для частиц, находящихся в параболической потенциальной яме, — соответствующие композиции из полиномов Эрмита; для электронного газа, движущегося в периодическом поле кристаллической решетки — одноэлектронные блоховские функции и т. д. Правда, первые два примера ввиду ограниченного числа участвующих в них частиц к статистическим системам отнесены быть не могут, а последний пример, хотя и соблазнителен с точки зрения электронной теории металлов, практически нереализуем, так как в отношении блоховских функций мы знаем их основные свойства, но не располагаем их аналитическим видом.

Таким образом, мы неизбежно приходим к выводу, что при рассмотрении статистических систем наиболее целесообразным выбором «строительного материала» для N -частичного базиса являются плоские волны — собственные функции квантово-механической задачи о движении одной частицы в потенциальном ящике, ограничивающем объем рассматриваемой системы. С математической точки зрения — это ценное приобретение, так как все интегральные свертки с такими функциями

приобретают вид интегралов Фурье и их модификаций, которые рассчитываются достаточно элементарно. Следует также заметить, что использование плоских волн и разложений по ним является как бы наследием или отголоском той интерпретации процедуры вторичного квантования, которая возникла и используется в полевых теориях при квантовании свободных полей. С прикладной же точки зрения использование возникшего по необходимости «плосковолнового» базиса уже заранее определяет характер дальнейших исследований, связанных с разработкой такой N -тельной (т. е. статистической) теории возмущений, в которой в качестве нулевого приближения используются собственные состояния соответствующего идеального газа.

Переходя к непосредственному выполнению указанной выше программы, выберем какую-либо полную ортонормированную систему функций $\{\varphi_f(x)\}$, характеризующих состояние одной изолированной частицы, помещенной в условия нашей системы. В частности, в случае пространственно однородной системы (нет внешних полей, создающих барометрическое распределение частиц по плотности), помещенной ради простоты в кубический сосуд объема $V = L^3$, функции $\{\varphi_f(x)\}$ — это плоские волны, нормированные в этом объеме. Для бозе-частиц без спина, полагая $f = \mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, $x = \mathbf{r}$, имеем в координатном представлении

$$\varphi_f(x) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

для ферми-частиц со спином $1/2$ (две возможные его ориентации) $f = (\mathbf{k}, s)$, $x = (\mathbf{r}, \sigma)$ и

$$\varphi_f(x) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_s(\sigma) = \Delta(s - \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

где спиновый индекс s принимает два значения $s = \pm 1$. В более сложных случаях в качестве одночастичных функций $\varphi_f(x)$ необходимо, конечно, использовать и более сложные конструкции.

Рассмотрим сначала случай бозе-систем — газа из бесспиновых (или с целым значением спина) частиц. Составляя в качестве основы для построения базисных функций N -частичной бозе-системы симметризованное произведение

$$\varphi_{f_1 \dots f_N}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{(P)} P \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N)$$

(суммирование проводится по всем различным перестановкам P величин x_1, \dots, x_N , или, что то же самое, по перестановкам нижних индексов f_1, \dots, f_N) и учитывая, что вследствие ортонормированности исходных одночастичных функций $\varphi_f(x)$

$$\begin{aligned} & \int (P \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N))^* \cdot (P' \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N)) dx_1 \dots dx_N = \\ & = \begin{cases} 1 & \text{в случае } P = P', \\ 0 & \text{в случае } P \neq P', \end{cases} \end{aligned}$$

мы можем представить уже нормированные N -частичные функции в виде

$$\Psi_{f_1 \dots f_N}(x_1, \dots, x_N) = \frac{\sum_{(P)} P \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N)}{\sqrt{\sum_{(P)} 1}}.$$

Учитывая положительный опыт, приобретенный при рассмотрении идеальных квантовых газов (см. т. 2, гл. 2), перейдем от f -представления к дискретному представлению чисел заполнения. Для этого рассмотрим все допустимые значения величины f и каждому из них сопоставим число заполнения $N_f = 0, 1, 2, \dots$, указывающее, сколько раз данное значение f встречается в совокупности индексов $\{f_i\} = f_1, \dots, f_N$. Таким образом, каждому индексу базисных функций $\{f_i\}$ (состоящему только из N элементов) мы сопоставляем набор $\{N_f\}$ (вообще говоря, бесконечный) целых неотрицательных чисел заполнения, сумма ненулевых значений которых удовлетворяет условию

$$\sum_f N_f = N.$$

Теперь мы можем использовать такой набор целых чисел $\{N_f\}$ в качестве условного индекса ξ у N -частичной базисной функции $\Psi_\xi(X)$, где $X = x_1, \dots, x_N$, так как соответствие

$$\varphi_{\{f_i\}}(X) \longleftrightarrow \varphi_{\{N_f\}}(X)$$

оказывается взаимно однозначным: располагая каким-либо набором $\{N_f\}$, мы можем восстановить функцию $\varphi_{\{f_i\}}(X)$ с точностью до расположения индексов f_1, \dots, f_N , которое в бозе-случае несущественно вследствие симметризованности функции $\varphi_{\{f_i\}}(X)$ по отношению к перестановкам x_1, \dots, x_N (или, что то же, по отношению к перестановкам величин f_1, \dots, f_N).

Число различных перестановок $\sum_{(P)} 1$ подсчитывается достаточно просто: оно равно числу всех возможных перестановок из N элементов по N , которое, чтобы исключить перестановки, не дающие новых сочетаний, необходимо разделить на произведение чисел перестановок среди одинаковых по значению f_i (т. е. встречающихся более одного раза в совокупности f_1, \dots, f_N). Используя дираковское обозначение, для уже нормированной базисной N -частичной функции получаем

$$\Psi_{\{N_f\}}(x_1, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{1}{N!} \prod_f N_f!} \cdot \varphi_{\{N_f\}}(x_1, \dots, x_N) = |\dots N_f \dots\rangle.$$

При рассмотрении ферми-систем в основу построения базисных функций полагаются антисимметризованные произведения одночастичных функций $\varphi_f(x)$

$$\varphi_{\{f_i\}}(x_1, \dots, x_N) = \text{Det} \|\varphi_{f_i}(x_j)\| = \sum_{(P)} (-1)^{\lambda_P} \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_N}(x_N),$$

где λ_P — четность перестановки P . Характерно, что как только в этом произведении окажутся два равных значения $f_i = f_j$, то вследствие совпадения двух столбцов в детерминанте такая функция обратится в нуль. С точки зрения квантовой механики это означает запрещенность подобных состояний ферми-системы, а это, в свою очередь, означает, что числа заполнения в этом случае могут принимать только два значения (принцип запрета Паули),

$$N_f = 0, 1; \quad \sum_f N_f = N.$$

Если теперь среди уже различных значений f_i установить какой-либо, но определенный порядок их следования, условно изображаемый в виде неравенства

$$f_1 < f_2 < \dots < f_N,$$

то переход от f -представления к представлению чисел заполнения, так же как и в бозе-случае, тоже будет взаимно однозначным,

$$\varphi_{\{f_i\}}(X) \longleftrightarrow \varphi_{\{N_f\}}(X),$$

и антисимметризованные нормированные базисные функции в ферми-случае будут формально выражаться тем же соотношением, что и в предыдущем случае (даже несколько проще, так как теперь при любых допустимых значениях чисел N_f всегда $N_f! = 1$).

б) Представление чисел заполнения для операторов динамических величин

Расклассифицируем, как всегда, операторы динамических величин по классам их динамической аддитивности: оператор аддитивного (или одночастичного) типа имеет вид однократной суммы

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i \leq N} A(i),$$

бинарного (или двухчастичного) типа — двойной суммы по номерам частиц

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{B}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 \leq N} B(i_1, i_2)$$

и т. д. В общем случае оператор s -частичного типа имеет структуру

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{G}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_s \leq N} S(i_1, \dots, i_s).$$

Используя введенные выше базисные функции $|\dots N_f \dots\rangle$, можно записать все эти операторы в представлении чисел заполнения. Учитывая, что одновременная перестановка x_1, \dots, x_N в функциях $\Psi_{\xi}^*(X)$ и $\Psi_{\xi}(X)$ не изменяет знака всего матричного элемента, будем иметь для оператора типа \mathfrak{A} после проведения суммирования по i

$$\langle \dots N_f \dots | \mathfrak{A} | \dots N'_f \dots \rangle = N \int \Psi_{\{N_f\}}^*(x_1, \dots, x_N) A(1) \Psi_{\{N'_f\}}(x_1, \dots, x_N) dx_1 \dots dx_N,$$

где оператор $A(1)$ действует только на переменную x_1 . Вводя для отдельного слагаемого оператора \mathfrak{A} матричное f -представление с помощью выбранных нами функций $\varphi_f(x)$,

$$(f | A | f') = \int \varphi_f^*(x'_1) A(1) \varphi_{f'}(x'_1) dx'_1,$$

и учитывая, что

$$\delta(x_1 - x'_1) = \sum_f \varphi_f(x_1) \varphi_f^*(x'_1),$$

получаем непосредственно в результате прямых подстановок, что

$$\langle \dots N_f \dots | \mathfrak{A} | \dots N'_f \dots \rangle = N \sum_{ff'} (f | A | f') \langle \dots N_f | (f' | \mathfrak{A} | f) | \dots N'_f \dots \rangle,$$

где не зависящая от конкретного вида оператора аддитивного типа \mathfrak{A} универсальная величина, целиком определяемая комбинацией одночастичных функций $\varphi_f(x)$,

$$\begin{aligned} \langle \dots N_f \dots | (f' | \alpha | f) | \dots N'_f \dots \rangle &= \\ &= \int \Psi_{\{N_f\}}^*(x_1, x_2, \dots, x_N) \varphi_f(x_1) \varphi_{f'}^*(x'_1) \Psi_{\{N'_f\}}(x'_1, x_2, \dots, x_N) dx'_1 dx_1 \dots dx_N, \end{aligned}$$

представляет собой в используемом f -представлении матрицу $(f' | \alpha | f)$ из операторов, действующих на числа заполнения $\{N_f\}$. Записывая полученный выше результат в виде

$$\langle \dots N_f \dots | \mathfrak{A} | \dots N'_f \dots \rangle = N \langle \dots N_f \dots | \sum_{ff'} (f | A | f') (f' | \alpha | f) | \dots N'_f \dots \rangle,$$

мы можем представить сам оператор \mathfrak{A} в условной, но элегантной форме

$$\mathfrak{A} = N \text{Sp } A(1) \alpha(1).$$

Для операторов бинарного или двухчастичного типа, включающих $N(N-1)/2$ слагаемых, представление чисел заполнения вводится совершенно аналогично. Имеем

$$\begin{aligned} \langle \dots N_f \dots | \mathfrak{B} | \dots N'_f \dots \rangle &= \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \int \Psi_{\{N_f\}}^*(x_1, \dots, x_N) B(1, 2) \Psi_{\{N'_f\}}(x_1, \dots, x_N) dx_1 \dots dx_N, \end{aligned}$$

откуда, вводя с помощью функций $\varphi_f(x)$ матричное f -представление для оператора $B(1, 2)$,

$$(f_1, f_2 | B | f'_1, f'_2) = \int \varphi_{f'_1}^*(x'_1) \varphi_{f'_2}^*(x'_2) B(1, 2) \varphi_{f_1}(x_1) \varphi_{f_2}(x_2) dx'_1 dx'_2,$$

получим искомое N_f -представление оператора типа \mathfrak{B} в виде

$$\begin{aligned} \langle \dots N_f \dots | \mathfrak{B} | \dots N'_f \dots \rangle &= \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \sum_{f_1 f_2 f'_1 f'_2} (f_1, f_2 | B | f'_1, f'_2) \langle \dots N_f \dots | (f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) | \dots N'_f \dots \rangle, \end{aligned}$$

где матрица $(f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2)$ универсальна для всех операторов бинарного типа и имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \dots N_f \dots | (f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) | \dots N'_f \dots \rangle &= \int \Psi_{\{N_f\}}^*(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N) \times \\ &\times \varphi_{f_1}(x_1) \varphi_{f_2}(x_2) \varphi_{f'_1}^*(x'_1) \varphi_{f'_2}^*(x'_2) \Psi_{\{N'_f\}}(x'_1, x'_2, x_3, \dots, x_N) dx'_1 dx'_2 dx_1 \dots dx_N, \end{aligned}$$

и мы можем представить сам оператор двухчастичного типа в виде

$$\mathfrak{B} = \frac{N(N-1)}{2} \text{Sp } B(1, 2) \beta(1, 2).$$

Представленное выше рассмотрение можно провести для любого значения s и получить общую формулу для s -частичного оператора

$$\mathfrak{S} = \frac{N!}{s!(N-s)!} \sum_{\substack{f_1 \dots f_s \\ f'_1 \dots f'_s}} (f_1 \dots f_s | S | f'_1 \dots f'_s) (f'_1 \dots f'_s | \sigma | f_1 \dots f_s),$$

где оператор σ в N_f -представлении представляет собой матрицу, элементы которой целиком определяются комбинациями выбранных нами одночастичных функций $\varphi_f(x)$,

$$\begin{aligned} \langle \dots N_f \dots | (f'_1 \dots f'_s | \sigma | f_1 \dots f_s) | \dots N_f \dots \rangle = \\ = \int \Psi_{\{N_f\}}^*(x_1, \dots, x_N) \varphi_{f_1}(x_1) \dots \varphi_{f_s}(x_s) \varphi_{f'_1}^*(x'_1) \dots \varphi_{f'_s}^*(x'_s) \times \\ \times \Psi_{\{N_f\}}(x'_1, \dots, x'_s, x_{s+1}, \dots, x_N) dx'_1 \dots dx'_s dx_1 \dots dx_N. \end{aligned}$$

Отметим очевидную особенность операторной матрицы σ — ее свойство симметрии по отношению к одновременной перестановке индексов $1, \dots, s$:

$$(P(f'_1 \dots f'_s) | \sigma | P(f_1 \dots f_s)) = (f'_1 \dots f'_s | \sigma | f_1 \dots f_s).$$

Так как все операторы σ построены с помощью одного и того же набора функций $\{\varphi_f(x)\}$, то возникают естественные связи между этими операторами разного ранга (разного значения s). Рассмотрим для конкретности, как оператор β выражается через простейший из операторов σ — оператор α . Для этого рассмотрим два оператора аддитивного типа \mathfrak{A}_1 и \mathfrak{A}_2 и выделим в их произведении аддитивную и бинарную части,

$$\mathfrak{A}_1 \mathfrak{A}_2 = \sum_{1 \leq i \leq N} \sum_{1 \leq j \leq N} A_1(i) A_2(j) = \sum_{1 \leq i \leq N} A_1(i) A_2(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} (A_1(i) A_2(j) + A_1(j) A_2(i)).$$

Записывая каждый член этого соотношения в представлении чисел заполнения с помощью операторов α и β (учитывая симметрию последнего) и вводя дополнительное суммирование, разбивающее произведение операторов $A_1(i) A_2(i)$ в первом слагаемом правой части,

$$N \sum_{f_1 f'_2} (f_1 | A_1 A_2 | f'_2) (f'_2 | \alpha | f_1) = \sum_{f_1 f_2 f'_1 f'_2} (f_1 | A_1 | f'_1) (f_2 | A_2 | f'_2) N \Delta(f'_1 - f_2) (f'_2 | \alpha | f_1),$$

получаем, перенеся все члены в левую часть равенства, что

$$\begin{aligned} \sum_{f_1 f_2 f'_1 f'_2} (f_1 | A_1 | f'_1) (f_2 | A_2 | f'_2) \left\{ N^2 (f'_1 | \alpha | f_1) (f'_2 | \alpha | f_2) - N \Delta(f'_1 - f_2) (f'_2 | \alpha | f_1) - \right. \\ \left. - N(N-1) (f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) \right\} = 0. \end{aligned}$$

Так как это соотношение имеет место для произвольного выбора операторов A_1 и A_2 , то выражение, стоящее внутри фигурных скобок, равно нулю при любых значениях величин f , и мы получаем искомое выражение «двухчастичного» оператора β через комбинацию простейших («одночастичных») операторов α

$$N(N-1) (f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) = N^2 (f'_1 | \alpha | f_1) (f'_2 | \alpha | f_2) - N \Delta(f'_1 - f_2) (f'_2 | \alpha | f_1).$$

Совершенно аналогично устанавливается связь матричных элементов операторов σ более высокого ранга с простейшим одночастичным оператором α .

Подобные соотношения в данном случае представляют собой универсальный вариант расщепления многочастичных конструкций, в результате которого они выражаются через одночастичные. Однако впечатление, что мы тем самым как бы решили извечную проблему расщепления цепочки уравнений для корреляционных функций, получив возможность выразить их через функции распределения более низшего ранга, иллюзорно. Операторы σ — это не многочастичные корреляционные функции,

существенно определяемые динамическими особенностями конкретной статистической системы. Эти особенности в наших формулах отделились и определяются матрицей $(f_1, \dots, f_s | S(1, \dots, s) | f'_1, \dots, f'_s)$ и структурой статистического распределения $w_{\{N_f\}}$, существенно зависящего от гамильтониана системы и определяющего средние значения s -частичных динамических величин

$$\langle \mathcal{G} \rangle = \text{Sp}_{\{N_f\}} \left\{ w_{\{N_f\}} \text{Sp}_{\{f\}} \{ S(1, \dots, s) \sigma(1, \dots, s) \} \right\},$$

через которые, собственно, и выражаются статистические корреляционные функции. Матричное же представление операторов σ — это чисто кинематическая конструкция, которая позволяет представить динамические величины в матричном N_f -представлении, генерируемом достаточно произвольно, но рационально выбранным N -частичным базисом, основывающимся, в свою очередь, на физически осмысленном f -представлении.

в) Оператор α в бозе-случае

Выделим в базисной функции $\Psi_{\{N_{f''}\}}^*(x_1, \dots, x_N)$ для начала множитель, явно зависящий от x_1 ,

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{1}{N!} \prod N_{f''}!} \cdot \varphi_{\{N_{f''}\}}^*(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \sqrt{\frac{1}{N!} \prod N_{f''}!} \sum_{(P)} P(\varphi_{f_1}^*(x_1) \dots \varphi_{f_N}^*(x_N)) = \\ &= \sum_g \sqrt{\frac{1}{N!} \prod N_{f''}!} \cdot \varphi_g^*(x_1) \varphi_{\{N_{f''} - \Delta(f'' - g)\}}^*(x_2, \dots, x_N), \end{aligned}$$

где $\Delta(f'' - g)$ — кронекеровская дельта-функция и где мы распространили суммирование по g на все допустимые значения величины f , полагая, что в случаях $N_g = 0$ автоматически $\varphi_{\{\dots, -1, \dots\}}^*(x_2, \dots, x_N) = 0$ (состояний с отрицательными числами заполнения не существует вообще). Тогда мы получим, что интегрирование по x_1 приводит к результату

$$\int dx_1 \Psi_{\{N_{f''}\}}^*(x_1, \dots, x_N) \varphi_f(x_1) = \sqrt{\frac{N_f}{N}} \Psi_{\{N_{f''} - \Delta(f'' - f)\}}^*(x_2, \dots, x_N).$$

Совершенно аналогично имеем

$$\int dx'_1 \Psi_{\{N'_{f''}\}}(x'_1, x_2, \dots, x_N) \varphi_{f'}^*(x'_1) = \sqrt{\frac{N'_{f'}}{N}} \Psi_{\{N'_{f''} - \Delta(f'' - f')\}}(x_2, \dots, x_N).$$

Интегрирование по x_2, \dots, x_N произведения $(N - 1)$ -частичных нормированных базисных функций Ψ^* и Ψ уже не составляет труда, и мы получим, перенося множитель N в левую часть,

$$N \langle \dots N_{f''} \dots | (f' | \alpha | f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle = \sqrt{N_f N'_{f'}} \prod_{f''} \Delta(N_{f''} - \Delta(f'' - f) - N'_{f''} + \Delta(f'' - f'))$$

или, выделяя отдельно случаи $f' = f$ и $f' \neq f$, будем соответственно иметь

$$N \langle \dots N_{f''} \dots | (f | \alpha | f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle = N_f \prod_{f''} \Delta(N_{f''} - N'_{f''}),$$

$$\begin{aligned}
N \langle \dots N_{f''} \dots | (f' | \alpha | f) | \dots N_{f''} \dots \rangle = \\
= \sqrt{N_f N_{f'}} \Delta(N_f - 1 - N_{f'}) \Delta(N_{f'} - N_{f'} + 1) \prod_{f'' \neq f, f'} \Delta(N_{f''} - N_{f''}).
\end{aligned}$$

Таким образом, диагональные по f элементы оператора α являются диагональными же операторами в представлении чисел заполнения, а оператор $(f' | \alpha | f)$ в случае $f' \neq f$ имеет смысл оператора увеличения на единицу числа заполнения $N_{f'}$ (т. е. оператора появления или, как говорят, «рождения» одночастичного состояния, описываемого функцией $\varphi_f(x)$), $N_f = N_{f'} + 1$, и одновременно уменьшения на единицу числа заполнения $N_{f''}$ (т. е. оператора исчезновения или, как говорят, «уничтожения» одночастичного состояния, описываемого волновой функцией $\varphi_{f'}^*(x)$), $N_{f'} = N_{f''} - 1$.

г) Бозе-операторы рождения и уничтожения

Проведенное выше рассмотрение явилось примером построенного по всем правилам квантовой механики матричного представления N -частичных динамических величин, в котором если отдельные числа заполнения и менялись, то скомпенсированно при обязательном соблюдении условия общей N -частичности. Введем теперь операторы, которые выполняют только одно из указанных выше действий, именно, определим оператор b_f , уменьшающий число заполнения с тем же индексом на единицу и не изменяющий всех других чисел заполнения (т. е. связывающий N -частичную базисную функцию с $(N - 1)$ -частичной),

$$\langle \dots N_{f'} \dots | b_f | \dots N_f \dots \rangle = \sqrt{N_f} \Delta(N_{f'} - N_f + 1) \prod_{f'' \neq f} \Delta(N_{f''} - N_{f''}).$$

Выписывая единственный ненулевой матричный элемент этого оператора, имеющий индекс f , и опуская для простоты выписывание сохраняющихся чисел $N_{f'}$ с индексами $f' \neq f$, имеем

$$\langle N_f - 1 | b_f | N_f \rangle = \sqrt{N_f}.$$

Такой оператор, уменьшающий число заполнения N_f на единицу, в литературе принято называть оператором уничтожения,

$$b_f | N_f \rangle = \sqrt{N_f} | N_f - 1 \rangle.$$

Оператор, сопряженный рассмотренному, определяется матричным представлением

$$\langle \dots N_f \dots | b_f^+ | \dots N_{f'} \dots \rangle = \sqrt{N_{f'}} \Delta(N_{f'} - N_f + 1) \prod_{f'' \neq f} \Delta(N_{f''} - N_{f''}),$$

из которого следует, что он увеличивает число заполнения $N_{f'}$ на единицу, в связи с чем его принято называть оператором рождения, так как

$$\langle N_{f'} + 1 | b_f^+ | N_{f'} \rangle = \sqrt{N_{f'} + 1}$$

или, убирая штрих,

$$b_f^+ | N_{f'} \rangle = \sqrt{N_{f'} + 1} | N_{f'} + 1 \rangle.$$

Отметим некоторые важные для всего аппарата квантовой теории свойства операторов b_f и b_f^+ . Во-первых, выписывая простейшие диагональные в представлении

чисел заполнения квадратичные комбинации этих операторов,

$$b_f^+ b_f |N_f\rangle = N_f |N_f\rangle; \quad b_f b_f^+ |N_f\rangle = (N_f + 1) |N_f\rangle,$$

получим, что

$$b_f^+ b_f = N_f; \quad b_f b_f^+ = 1 + N_f.$$

Во-вторых, вспоминая, что в случае $f' \neq f$ введенные выше операторы действуют на разные «аргументы» N_f и $N_{f'}$, получим следующие характерные для операторов b и b^+ соотношения коммутации

$$[b_f, b_{f'}^+]_- = b_f b_{f'}^+ - b_{f'}^+ b_f = \Delta(f - f'); \quad [b_f, b_{f'}]_- = [b_{f'}^+, b_f^+]_- = 0.$$

Операторы, подчиненные перестановочным соотношениям указанного выше типа, называются бозе-операторами рождения и уничтожения.

Наконец, отметим непосредственно следующие из приведенных выше формул правила коммутации бозе-операторов с функциями от чисел N_f . Так как

$$b_f (N_f)^n = b_f b_f^+ b_f \dots b_f^+ b_f = b_f b_f^+ \dots b_f b_f^+ b_f = (N_f + 1)^n b_f,$$

то, взяв эрмитовое сопряжение и сдвинув число N_f на единицу, получим

$$(N_f)^n b_f^+ = b_f^+ (N_f + 1)^n, \quad \text{т.е.} \quad b_f^+ (N_f)^n = (N_f - 1)^n b_f^+,$$

откуда уже следуют соотношения «коммутации» операторов b_f и b_f^+ с произвольной функцией $F(N_f) = F(b_f^+ b_f)$

$$b_f F(N_f) = F(N_f + 1) b_f; \quad b_f^+ F(N_f) = F(N_f - 1) b_f^+,$$

глядя на которые легко осознать условность терминологии, используемой по отношению к операторам b_f и b_f^+ .

д) Представление вторичного квантования для операторов динамических величин в бозе-случае

Возвращаясь к формулам, определяющим матрицу $(f'|\alpha|f)$, мы замечаем, что введенное выше матричное N_f -представление бозе-операторов рождения и уничтожения, являющееся как бы половинками матрицы α в том же представлении, введено с явной целью выразить целиком через них этот одночастичный оператор. Производя непосредственную подстановку и необходимые суммирования по промежуточным значениям чисел заполнения в произведении матриц, определяющих операторы b_f^+ и $b_{f'}$, мы сразу убеждаемся, что при $f \neq f'$

$$\langle \dots N_{f''} \dots | b_f^+ b_{f'} | \dots N'_{f''} \dots \rangle = N \langle \dots N_{f''} \dots | (f'|\alpha|f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle,$$

или в операторной форме уже для любого соотношения f и f'

$$N(f'|\alpha|f) = b_f^+ b_{f'}.$$

Двухчастичный оператор β в этом же представлении определяется сразу по формуле, устанавливающей его связь с оператором α ,

$$N(N - 1)(f'_1, f'_2|\beta|f_1, f_2) = b_{f'_1}^+ (b_{f'_1} b_{f'_2}^+ - \Delta(f'_1 - f'_2)) b_{f'_2} = b_{f'_1}^+ b_{f'_2}^+ b_{f'_2} b_{f'_1}.$$

В общем же случае, как несложно показать,

$$N(N-1)\dots(N-s+1)(f'_1, \dots, f'_s | \sigma | f_1, \dots, f_s) = b_{f_1}^+ \dots b_{f_s}^+ b_{f'_1} \dots b_{f'_s}.$$

Заметим, что расположение операторов с крестиками и без них друг относительно друга в бозе-случае произвольно, поэтому «зеркальное» по номерам расположение индексов f и f' у операторов b^+ и b пока ничем не оправдано, кроме чисто эстетических соображений.

Таким образом, выражая операторы динамических величин типа \mathfrak{A} , \mathfrak{B} и т. д. через соответствующие комбинации бозе-операторов рождения и уничтожения, действующих в пространстве чисел заполнения, мы приходим к представлению, которое для этих операторов динамических величин и называется представлением вторичного квантования,

$$\mathfrak{A} = \sum_{f f'} (f | A | f') b_f^+ b_{f'},$$

$$\mathfrak{B} = \frac{1}{2} \sum_{f_1 f_2 f'_1 f'_2} (f_1, f_2 | B | f'_1, f'_2) b_{f_1}^+ b_{f_2}^+ b_{f'_1} b_{f'_2},$$

$$\mathfrak{C} = \frac{1}{s!} \sum_{\{f_i, f'_i\}} (f_1, \dots, f_s | S | f'_1, \dots, f'_s) b_{f_1}^+ \dots b_{f_s}^+ b_{f'_1} \dots b_{f'_s},$$

где $(f | A | f')$, $(f_1, f_2 | B | f'_1, f'_2)$ и т. д. — f -представления операторов $A(1)$, $B(1, 2)$ и т. д.

е) Оператор α в ферми-случае

Чтобы выделить в антисимметризованной базисной функции $\Psi_{\{N, f''\}}(X)$ множители, зависящие от x_1 , разложим определяющий эту функцию детерминант по первой строке, составленной из последовательности одночастичных функций $\varphi_{f_k}(x_1)$ с различными значениями индексов f_k , и учтем, что коэффициенты этого разложения представляют собой детерминанты на единицу меньшего ранга, непосредственно выражающиеся через $(N-1)$ -частичные базисные функции,

$$\Psi_{\{N, f''\}}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{k=1}^N (-1)^{k-1} \varphi_{f_k}(x_1) \sqrt{(N-1)!} \cdot \Psi_{\{N, f'' - \Delta(f'' - f_k)\}}(x_2, \dots, x_N).$$

Число k , как и сумма по этому числу, явно выпадает из стиля используемого N_f -представления, однако, благодаря тому, что в ферми-случае числа заполнения равны нулю либо единице, а индексы f_g расположены в оговоренном нами порядке $f_1 < f_2 < \dots < f_N$, удастся выразить его через числа заполнения, именно,

$$k-1 = \sum_{f'' < f_k} N_{f''},$$

а сумму по этому числу записать в виде

$$\sum_{k=1}^N \varphi_{f_k}(x_1) F(f_k) = \sum_g N_g \varphi_g(x_1) F(g)$$

(вместо N_g в этой формуле можно было поставить любую положительную степень этого числа, так как эта величина все равно равна единице или нулю в зависимости

от того, попадает индекс g на одно из значений f_1, \dots, f_N или нет). Таким образом, мы переходим к полностью N_f -представлению разложения N -частичной базисной функции по одночастичным функциям $\varphi_g(x)$, зависящим от первого ее аргумента,

$$\Psi_{\{N_{f''}\}}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_g (-1)^{\sum_{f'' < g} N_{f''}} N_g \varphi_g(x_1) \Psi_{\{N_{f''} - \Delta(f'' - g)\}}(x_2, \dots, x_N).$$

Выполняя операции интегрирования, аналогичные рассмотренным при исследовании бозе-случая, получим в случаях $f' = f$ и $f' \neq f$ соответственно

$$N \langle \dots N_{f''} \dots | (f | \alpha | f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle = N_f \prod_{f''} \Delta(N_{f''} - N'_{f''}),$$

$$\begin{aligned} N \langle \dots N_{f''} \dots | (f' | \alpha | f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle = \\ = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} (-1)^{\sum_{f'' < f'} N_{f''}} N_f N'_{f'} \Delta(N_f - 1 - N'_f) \Delta(N_{f'} - N'_{f'} + 1) \prod_{f'' \neq f, f'} \Delta(N_{f''} - N'_{f''}). \end{aligned}$$

Структура этих формул та же, что и в бозе-случае, за исключением возникших характерных знаковых множителей во втором выражении (отсутствие знака квадратного корня над числами N_f и $N'_{f'}$ несущественно, так как эти числа в данном случае равны либо нулю, либо единице).

ж) Операторы рождения и уничтожения Паули и Ферми

Поступая, как и при исследовании бозе-случая, определим матричное представление оператора a_f , изменяющего число N_f на единицу,

$$\langle \dots N'_f \dots | a_f | \dots N_f \dots \rangle = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} N_f \Delta(N'_f - N_f + 1) \prod_{f'' \neq f} \Delta(N'_{f''} - N_{f''}),$$

единственный отличный от нуля матричный элемент которого равен

$$\langle N_f - 1 | a_f | N_f \rangle = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} N_f,$$

что дает нам основание считать оператор a_f оператором уничтожения (в смысле оператором уменьшения числа N_f на единицу),

$$a_f | N_f \rangle = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} N_f | N_f - 1 \rangle.$$

Определяя оператор a_f^+ как сопряженный к только что введенному a_f

$$\langle \dots N_f \dots | a_f | \dots N'_f \dots \rangle^+ = \langle \dots N'_f \dots | a_f^+ | \dots N_f \dots \rangle,$$

получим, что

$$a_f^+ | N_f \rangle = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} (N_f + 1) | N_f + 1 \rangle,$$

т. е. оператор a_f^+ выступает в роли парного по отношению к a_f оператора рождения (оператора увеличения числа N_f на единицу). Если мы выделим в этих соотношениях знаковый множитель

$$a_f^+ | N_f \rangle = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} b_f^+ | N_f \rangle; \quad a_f | N_f \rangle = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} b_f | N_f \rangle,$$

то оставшиеся операторы b_f^+ и b_f — это по своей природе и своему действию те же операторы рождения и уничтожения, которые мы рассматривали ранее. Принципиально, однако, что операторы b_f^+ и b_f , в отличие от бозе-случая, действуют в урезанном пространстве чисел заполнения $N_f = 0, 1$, так как состояния с $N_f > 1$ запрещены, и соответствующие таким нефизическим значениям N_f функции $|N_f\rangle = 0$. С целью подчеркнуть последнее обстоятельство, мы можем так видоизменить запись результата действия b_f^+ (естественно, никак не испортив этого оператора), чтобы упомянутый выше нулевой результат, возникающий вследствие принципа запрета Паули, возник бы в виде равного нулю множителя перед несуществующей базисной функцией $|2\rangle$ (как это автоматически возникает перед несуществующей функцией $|-1\rangle$),

$$b_f|N_f\rangle = N_f|N_f - 1\rangle; \quad b_f^+|N_f\rangle = (1 + N_f)|1 + N_f\rangle = (1 - N_f)|1 + N_f\rangle.$$

С помощью этих формул мы легко найдем элементарные диагональные комбинации операторов b^+ и b ,

$$b_f b_f^+ |N_f\rangle = (1 - N_f) |N_f\rangle; \quad b_f^+ b_f |N_f\rangle = N_f |N_f\rangle$$

(мы учли здесь, что $N_f^2 = N_f$), откуда следуют формулы

$$b_f^+ b_f = N_f; \quad b_f b_f^+ = 1 - N_f,$$

позволяющие записать характерные перестановочные соотношения для этих операторов,

$$b_f^+ b_f + b_f b_f^+ = [b_f^+, b_f]_+ = 1,$$

$$[b_{f'}, b_f^+]_- = 0 \quad \text{в случае } f \neq f',$$

$$[b_{f'}, b_f]_- = [b_{f'}^+, b_f^+]_- = 0 \quad \text{при любых } f \text{ и } f'.$$

Операторы с такой смешанной коммутационной-антикоммутационной алгеброй называются операторами Паули, вследствие того что они непосредственно связаны с двухрядными спиновыми матрицами Паули σ_f ,

$$b_f = \frac{1}{2}(\sigma_f^x + i\sigma_f^y); \quad b_f^+ = \frac{1}{2}(\sigma_f^x - i\sigma_f^y); \quad b_f^+ b_f = \frac{1}{2}(1 - \sigma_f^z).$$

Отметим еще характерное правило перенесения операторов b_f и b_f^+ через функцию от числа заполнения $N_f = b_f^+ b_f$,

$$b_f F(N_f) = F(1 - N_f) b_f; \quad b_f^+ F(N_f) = F(1 - N_f) b_f^+.$$

Это правило окажется для нас существенным при рассмотрении перестановочных свойств операторов a_f^+ и a_f . Действительно, обращая внимание на то, что входящий в их определение знаковый множитель определяется четностью суммы $\sum_{f'' < f} N_{f''}$, в которую число заполнения N_f не входит, мы можем переносить через этот знаковый множитель любые операторы $b_{f'}^+$ и $b_{f'}$, если только $f' \geq f$, в то время как в случае $f' < f$ такое перемещение должно сопровождаться (вследствие изменения на единицу числа $N_{f'}$, входящего в сумму $\sum_{f'' < f} N_{f''}$) изменением знака у всего выражения.

Поэтому мы можем написать

$$a_f^+ a_f |N_f\rangle = (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} b_f^+ (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} b_f |N_f\rangle = \left[(-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} \right]^2 b_f^+ b_f |N_f\rangle$$

и аналогичное выражение для $a_f a_f^+ |N_f\rangle$, откуда сразу получим, что диагональные по f комбинации операторов a^+ и a имеют тот же вид, что и для операторов Паули,

$$a_f^+ a_f = N_f; \quad a_f a_f^+ = 1 - N_f.$$

Рассматривая же случай произведения двух операторов типа a (с крестиками или без них — в данном случае это уже не существенно) с различными индексами $f \neq f'$ (для конкретности можно считать $f' < f$), мы получим, что действие их антикоммутиатора вследствие упомянутого выше изменения знака при перенесении оператора с индексом f' через знаковый множитель, содержащий в показателе число $N_{f'}$, совпадает с результатом действия на ту же функцию $|\dots N_{f'} \dots N_f \dots\rangle$ коммутатора операторов Паули, который, как мы установили ранее, равен нулю,

$$\begin{aligned} (a_f a_{f'} + a_{f'} a_f) |\dots N_{f'} \dots N_f \dots\rangle &= \\ &= (-1)^{\sum_{f'' < f} N_{f''}} (-1)^{\sum_{f'' < f'} N_{f''}} (b_f b_{f'} - b_{f'} b_f) |\dots N_{f'} \dots N_f \dots\rangle = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, мы приходим к следующим перестановочным соотношениям для операторов a_f^+ и a_f :

$$[a_f^+, a_{f'}]_+ = \Delta(f - f'), \quad [a_f^+, a_{f'}^+]_+ = [a_{f'}, a_f]_+ = 0.$$

Операторы, удовлетворяющие таким соотношениям, называются ферми-операторами рождения и уничтожения.

Напишем еще одно полезное соотношение для операторов Паули или Ферми, связанное с ограничением на числа заполнения: так как $N_f = 0$ либо $N_f = 1$, то вне зависимости от расположения пары одинаковых операторов результат их действия всегда равен нулю:

$$a_f a_f = a_f^+ a_f^+ = 0; \quad b_f b_f = b_f^+ b_f^+ = 0.$$

з) Представление вторичного квантования для операторов динамических величин в ферми-случае

Поступая так же, как в бозе-случае, расписывая в представлении чисел заполнения произведение операторов $a_f^+ a_{f'}$ в случаях $f' = f$ и $f' \neq f$ и производя суммирование по промежуточным матричным индексам, соединяющим матричные $N_{f''}$ -представления операторов a_f^+ и $a_{f'}$, убеждаемся, что в силу самого способа введения этих операторов вне зависимости от соотношений между f и f'

$$N(f' | \alpha | f) = a_f^+ a_{f'}.$$

Для двухчастичного оператора β теперь получаем, что

$$N(N - 1)(f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) = a_{f'_1}^+ (a_{f'_2} a_{f_2}^+ - \Delta(f'_1 - f_2)) a_{f_2} = -a_{f'_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f'_2} a_{f_2}.$$

Перестраивая операторы в правой части так, чтобы расположение номеров у индексов f было «зеркальным», получим формулу, по виду полностью совпадающую с рассмотренной ранее,

$$N(N - 1)(f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) = a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f'_2} a_{f'_1}.$$

Аналогично для общего случая

$$N(N-1)\dots(N-s+1)(f'_1, \dots, f'_s | \sigma | f_1, \dots, f_s) = a_{f_1}^+ \dots a_{f_s}^+ a_{f'_s} \dots a_{f'_1}$$

(в отличие от бозе-случая указанный порядок следования индексов у операторов рождения и уничтожения теперь строго фиксирован).

Таким образом, представление вторичного квантования для операторов динамических величин как в бозе-, так и в ферми-случаях выражается в терминах операторов рождения и уничтожения одними и теми же формулами.

В связи с этим в последующем изложении мы будем обозначать операторы рождения и уничтожения, как это принято повсеместно, символами a_f^+ и a_f , а тип статистики (т. е. характер коммутационных соотношений для этих операторов) оговаривать дополнительно.

и) Рациональный выбор f -представления и некоторые основные операторы динамических величин

Наиболее простой и вместе с тем наиболее употребительный выбор функций $\varphi_f(x)$ был нами уже определен в пункте а) этого параграфа. Это — плоские волны, нормированные в объеме V ,

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

умноженные при необходимости на спиновые функции $u_s(\sigma) = \Delta(s - \sigma)$.

Рассматривая в качестве характерных примеров систему бесспиновых частиц (бозе-система) и систему частиц со спином $1/2$ (ферми-система), мы будем полагать $f = \mathbf{k}$ (в индексе условно опуская знак вектора $\mathbf{k} \rightarrow k$) или, соответственно, $f = (\mathbf{k}, s)$ (в индексе условно просто k), где каждый из компонентов волнового вектора k_α , $\alpha = x, y, z$, пробегает в случае $V = L^3 \rightarrow \infty$ квазинепрерывный ряд значений (см. т. 2, гл. 1, § 2)

$$k_\alpha = \frac{\pi}{L} n_\alpha, \quad n_\alpha = 1, 2, 3, \dots,$$

а величина s — только два значения $s = +1$ или $s = -1$.

В приложениях вместо волнового числа \mathbf{k} большей частью используется импульс $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Мы не будем делать различия между этими вариантами (не забывая, однако, о дополнительном множителе \hbar), используя подчас более компактную «импульсную» терминологию в обозначении представления и т. п.

Таким образом, для того чтобы выписать окончательные выражения для конкретных операторов в «импульсном» представлении вторичного квантования, нам необходимо будет вычислить по плоским волнам матричные элементы

$$(k|A|k') = \int \varphi_k^*(x_1) A(1) \varphi_{k'}(x_1) dx_1,$$

$$(k_1, k_2|B|k'_1, k'_2) = \int \varphi_{k_1}^*(x_1) \varphi_{k_2}^*(x_2) B(1, 2) \varphi_{k'_1}(x_1) \varphi_{k'_2}(x_2) dx_1 dx_2$$

и т. д., где интегрированием по dx обозначено интегрирование по $d\mathbf{r}$ в области V , и при наличии у частиц системы спина дополнительное суммирование по s .

Чтобы сделать рассмотрение конкретным, введем представление вторичного квантования для нескольких операторов, определяющих основные свойства рассматриваемых статистических систем. Начиная с величин аддитивного динамического

типа, отметим прежде всего операторы полного числа частиц N , полного импульса системы \mathbf{P} и суммы кинетических энергий всех частиц системы («нулевой» гамильтониан) H_0 :

$$N = \sum_{1 \leq i \leq N} 1; \quad \mathbf{P} = \sum_{1 \leq i \leq N} \mathbf{p}_i; \quad H_0 = \sum_{1 \leq i \leq N} \frac{p_i^2}{2m}.$$

Вычисляя матричные элементы от операторов

$$A(1) = 1; \quad A(1) = \mathbf{p}_1 = \hbar \mathbf{k}_1 = \frac{\hbar}{i} \nabla_1; \quad A(1) = \frac{p_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2$$

и учитывая, что

$$\frac{1}{V} \int_{(V)} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

получим, используя общую формулу для представления вторичного квантования операторов аддитивных величин,

$$N = \sum_k a_k^+ a_k; \quad \mathbf{P} = \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k; \quad H_0 = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^+ a_k,$$

где суммирование производится в бозе-случае по $k = (\mathbf{k}) = (k_x, k_y, k_z)$ и в ферми-случае по $k = (\mathbf{k}, s)$, а операторы рождения и уничтожения удовлетворяют соответствующим типу статистики перестановочным соотношениям.

Из величин аддитивного типа остановимся еще на операторе энергии взаимодействия частиц системы с внешним статическим полем $U(\mathbf{r})$. Полагая, что потенциал этого поля тоже может быть разложен в ряд (или интеграл) по плоским волнам, введем в рассмотрение его фурье-компоненту

$$u(\boldsymbol{\kappa}) = \int_{(V)} U(\mathbf{r}) e^{i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Так как для системы N частиц их взаимодействие с полем $U(\mathbf{r})$ представляется в виде аддитивной суммы

$$U = \sum_{1 \leq i \leq N} U(\mathbf{r}_i),$$

то $A(1) = U(\mathbf{r}_1)$, и мы получаем, сворачивая интеграл по \mathbf{r}_1 в фурье-компоненту потенциала $U(\mathbf{r}_1)$, что

$$U = \frac{1}{V} \sum_{k\boldsymbol{\kappa}} u(\boldsymbol{\kappa}) a_k^+ a_{k+\boldsymbol{\kappa}} = \frac{1}{V} \sum_{k\boldsymbol{\kappa}} u^*(\boldsymbol{\kappa}) a_{k+\boldsymbol{\kappa}}^+ a_k$$

(здесь и далее в подобных случаях мы считаем $k = (\mathbf{k}, s)$, $\boldsymbol{\kappa} = (\boldsymbol{\kappa})$ и $k + \boldsymbol{\kappa} = (\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}, s)$, т. е. индекс s сопровождает только суммирование по волновому вектору \mathbf{k}).

Рассматривая однокомпонентную систему из N одинаковых частиц, следует остановиться еще на одном характеризующем такую систему операторе, определяющем взаимодействие этих частиц друг с другом. В простейшем случае, когда в расчет идет только двухчастичное взаимодействие частиц системы, зависящей только от их

пространственного расположения, — это оператор бинарного типа

$$H_1 = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

Полагая, что потенциал парного взаимодействия $\Phi(\mathbf{R}) = \Phi(R)$ имеет математически осмысленное фурье-представление

$$\nu(\mathbf{k}) = \int \Phi(R) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} d\mathbf{R},$$

можно представить потенциал взаимодействия частиц друг с другом $\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ в импульсном представлении (т. е. представлении волновых чисел \mathbf{k}) в виде

$$\begin{aligned} (\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) | \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) &= \frac{1}{V^2} \int e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 - i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_2} \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{i\mathbf{k}'_1\mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}'_2\mathbf{r}_2} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ &= \Delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \frac{1}{V} \nu(|\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1|), \end{aligned}$$

и, снимая одно из четырех суммирований в формуле для представления оператора типа \mathfrak{B} , полагая $\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1 = \boldsymbol{\kappa}$ и рационально переобозначая индексы суммирования, мы сразу получаем окончательный вариант представления оператора H_1 во вторично-квантованном виде

$$H_1 = \frac{1}{2V} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \nu(\boldsymbol{\kappa}) a_{\mathbf{k}+\boldsymbol{\kappa}}^+ a_{\mathbf{k}'-\boldsymbol{\kappa}}^+ a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}},$$

где, как и в предыдущем случае, $\boldsymbol{\kappa} = (\boldsymbol{\kappa})$, $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa} = (\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}, \sigma)$, $\mathbf{k}' - \boldsymbol{\kappa} = (\mathbf{k}' - \boldsymbol{\kappa}, \sigma')$, $\mathbf{k} = (\mathbf{k}, \sigma)$ и $\mathbf{k}' = (\mathbf{k}', \sigma')$.

Рассмотренные выше операторы имеют достаточно наглядную интерпретацию. Диагональный по N_p оператор, например гамильтониан идеальной системы H_0 , представлен как сумма по импульсу кинетических энергий $p^2/(2m)$, умноженных на число частиц в системе $a_p^+ a_p = N_p$, обладающих данным значением импульса. Аналогично интерпретируются операторы N и P .

Оператор взаимодействия частиц с внешним полем U тоже представлен как сумма, но каждое ее слагаемое — это как бы отдельный «акт рассеяния» на одной гармонике внешнего поля $u(\boldsymbol{\kappa})$ частицы с импульсом \mathbf{k} (она «уничтожается») с переходом

ее в состояние $\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}$ (с этим импульсом она «рождается») и отдачей импульса $\boldsymbol{\kappa}$ внешнему источнику поля. Оператор H_1 имеет аналогичное строение, только каждое слагаемое в нем как бы изображает (в условном смысле) рассеяние двух частиц друг на друге, $(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \rightarrow (\mathbf{k} + \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{k}' - \boldsymbol{\kappa})$, с передачей друг другу импульса $\boldsymbol{\kappa}$ (в нашей модели взаимодействия функция $\Phi_{12} = \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ не зависит от спиновых переменных частиц, поэтому при упомянутом «рассеянии» спиновые индексы s и s' сохраняются за «частицами»).

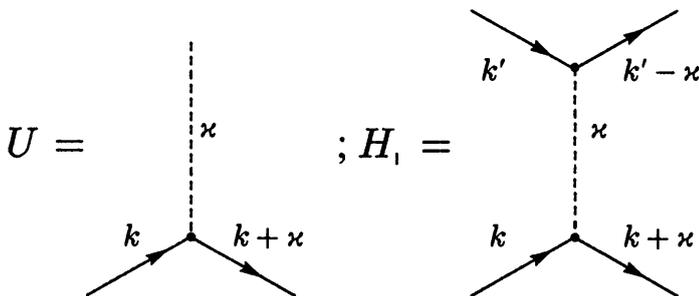


Рис. 1. Графическое изображение операторов U и H_1 во вторично-квантованном представлении. Входящие стрелки означают операторы уничтожения, выходящие — операторы рождения, пунктирные линии — гармоники потенциалов взаимодействия с внешним полем $u(\boldsymbol{\kappa})/V$ или частиц друг с другом $\nu(\boldsymbol{\kappa})/(2V)$

Эту интерпретацию удобно представить в виде графических схем (см. рис. 1), помогающих не только запомнить вторично-квантованную структуру операторов U и H_1 . При развитии в дальнейшем теории возмущений по степеням интенсивности взаимодействия частиц системы друг с другом и внешним полем эти же графические элементы служат основой диаграммных представлений интегральных конструкций отдельных вкладов по теории возмущений в виде достаточно простых в изображении и интерпретации диаграмм.

В заключение данного обзора простейших операторов введем еще один оператор, играющий важную роль в исследованиях статистических систем и уже неявно присутствующий в конструкциях операторов U и H_1 , — оператор фурье-компоненты плотности числа частиц системы. Определяя плотность числа частиц системы в координатном представлении как

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i); \quad \int_{(V)} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N,$$

получим для ее фурье-компоненты аддитивную динамическую структуру

$$\rho_{\mathbf{x}} = \int_{(V)} \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{x}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{1 \leq i \leq N} e^{i\mathbf{x}\mathbf{r}_i},$$

в которой $A(1) = e^{i\mathbf{x}\mathbf{r}_1}$. Поэтому в представлении вторичного квантования будем сразу иметь

$$\rho_{\mathbf{x}} = \sum_k a_{k+\mathbf{x}}^+ a_k,$$

где суммирование производится, как и ранее, по $k = (\mathbf{k}, s)$.

Отметим некоторые очевидные свойства операторов $\rho_{\mathbf{x}}$. Согласно определению (в любом из представлений)

$$\rho_{\mathbf{x}}^+ = \rho_{-\mathbf{x}}.$$

Легко показать также, что операторы $\rho_{\mathbf{x}}$ вне зависимости от того, составлены они из бозе или ферми-операторов, коммутируют друг с другом,

$$[\rho_{\mathbf{x}}, \rho_{\mathbf{x}'}]_- = 0,$$

а коммутатор с отдельным оператором a_k отличен от нуля,

$$[a_k, \rho_{\mathbf{x}}]_- = a_{k-\mathbf{x}}.$$

Мы получаем возможность теперь записать в терминах $\rho_{\mathbf{x}}$ оператор взаимодействия частиц системы с внешним полем

$$U = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{x}} u^*(\mathbf{x}) \rho_{\mathbf{x}},$$

а также получить удобную формулу для оператора взаимодействия частиц друг с другом

$$H_1 = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{x}} \nu(\mathbf{x}) \rho_{\mathbf{x}}^+ \rho_{\mathbf{x}} - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{x}} \nu(\mathbf{x}) \sum_k a_k^+ a_k = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{x}} \nu(\mathbf{x}) \rho_{\mathbf{x}}^+ \rho_{\mathbf{x}} - \frac{N}{2V} \sum_{\mathbf{x}} \nu(\mathbf{x}),$$

которая часто используется в приложениях наряду с приведенной ранее. Отметим также, что оператор $\rho_{\mathbf{x}}$ коммутирует с оператором полного числа частиц $N = \sum_k a_k^+ a_k$

и, следовательно, с оператором взаимодействия частиц друг с другом и полным гамильтонианом системы $H = H_0 + H_1$.

к) Координатное представление операторов рождения и уничтожения (операторные волновые функции)

Остановимся еще на одном часто используемом варианте представления операторов во вторично квантованном виде. Введем с помощью преобразования Фурье x -представление операторов рождения и уничтожения,

$$\Psi^+(x) = \sum_f a_f^+ \varphi_f^*(x); \quad \Psi(x) = \sum_f a_f \varphi_f(x)$$

(в рассмотренном выше варианте представления f — это импульс и спин, x — координата и то же спиновое число). Обратное преобразование имеет вид

$$a_f^+ = \int dx \Psi^+(x) \varphi_f(x), \quad a_f = \int dx \Psi(x) \varphi_f^*(x)$$

(запись этих преобразований в виде сумм по f и интегралов по x условна).

Учитывая коммутационные соотношения для операторов a_f^+ и a_f , получаем сразу, что для бозе и ферми-случаев (верхний и нижний знаки)

$$[\Psi(x'), \Psi^+(x)]_{\mp} = \sum_{f, f'} \varphi_f^*(x) \varphi_{f'}(x') [a_{f'}, a_f^+]_{\mp} = \sum_f \varphi_f(x) \varphi_f^*(x') = \delta(x - x'),$$

$$[\Psi(x'), \Psi(x)]_{\mp} = [\Psi^+(x'), \Psi^+(x)]_{\mp} = 0.$$

С помощью введенных таким образом операторных волновых функций необходимые нам операторы динамических величин представляются совершенно эквивалентными введенным ранее в пунктах д) и з) формулами

$$\mathfrak{A} = \int \Psi^+(x_1) A(1) \Psi(x_1) dx_1,$$

$$\mathfrak{B} = \frac{1}{2} \iint \Psi^+(x_1) \Psi^+(x_2) B(1, 2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) dx_1 dx_2,$$

$$\mathfrak{C} = \frac{1}{s!} \int \dots \int \Psi^+(x_1) \dots \Psi^+(x_s) S(1, \dots, s) \Psi(x_s) \dots \Psi(x_1) dx_1 \dots dx_s,$$

структура которых, если не принимать во внимание множитель $1/s!$, напоминает выражения для квантово-механических средних от величин $S(1, \dots, s)$, взятых по «волновым функциям», представляющим собой произведение s «одночастичных» операторных функций $\Psi(x_i)$.

л) Уравнения движения для операторов рождения и уничтожения

Представим операторную волновую функцию $\Psi(x)$ в гейзенберговском временном представлении,

$$\Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$$

и вычислим коммутатор в правой части уравнения движения для этого оператора

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = [\Psi(x, t), H]_- = e^{\frac{i}{\hbar} H t} [\Psi(x), H]_- e^{-\frac{i}{\hbar} H t},$$

имея в виду систему N одинаковых частиц с парным взаимодействием, оператор Гамильтона которой в представлении вторичного квантования можно записать с помощью операторных волновых функций в виде

$$H = \int dx_1 \Psi^+(x_1) H(1) \Psi(x_1) + \frac{1}{2} \iint dx_1 dx_2 \Psi^+(x_1) \Psi^+(x_2) \Phi(1, 2) \Psi(x_2) \Psi(x_1),$$

где

$$H(1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1); \quad \Phi(1, 2) = \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Так как оператор $H(1)$ действует только на x_1 , то безболезненно перенося во втором слагаемом оператор $\Psi(x)$ через произведение $H(1)\Psi(x_1)$ влево (в ферми-случае изменится только знак) и учитывая перестановочные соотношения для операторов Ψ , получаем

$$\begin{aligned} & \int dx_1 \Psi(x) \Psi^+(x_1) H(1) \Psi(x_1) - \Psi^+(x_1) H(1) \Psi(x_1) \Psi(x) = \\ & = \int dx_1 \Psi(x) \Psi^+(x_1) H(1) \Psi(x_1) \mp \Psi^+(x_1) \Psi(x) H(1) \Psi(x_1) = \\ & = \int dx_1 \delta(x - x_1) H(1) \Psi(x_1) = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) \Psi(x). \end{aligned}$$

Рассчитывая коммутатор $\Psi(x)$ со вторым слагаемым гамильтониана H_1 , вынесем неоператорную функцию координат $\Phi(1, 2)$ за общую скобку,

$$\begin{aligned} [\Psi(x), H_1]_- &= \frac{1}{2} \iint dx_1 dx_2 \Phi(1, 2) \times \\ & \times (\Psi(x) \Psi^+(x_1) \Psi^+(x_2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) - \Psi^+(x_1) \Psi^+(x_2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) \Psi(x)), \end{aligned}$$

а затем, перенося в первом слагаемом оператор $\Psi(x)$ через $\Psi^+(x_1)$, $\Psi^+(x_2)$ и произведение $\Psi(x_2)\Psi(x_1)$, получим от первых двух операций дополнительные члены

$$\delta(x_1 - x) \Psi^+(x_2) \Psi(x_2) \Psi(x_1) \pm \delta(x_2 - x) \Psi^+(x_1) \Psi(x_2) \Psi(x_1),$$

а результат третьей перестановки аннигилирует пятерку операторов, составляющих второе слагаемое коммутатора. Переставив местами операторы

$$\Psi(x_2) \Psi(x_1) = \pm \Psi(x_1) \Psi(x_2),$$

замечаем, что оставшиеся от коммутатора $[\Psi(x), H_1]_-$ два слагаемых отличаются друг от друга только обозначением переменной интегрирования. Снимая один из интегралов с помощью δ -функции, получаем уравнение движения для операторной волновой функции $\Psi(x, t)$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) \Psi(x, t) + \int dx' \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi^+(x', t) \Psi(x', t) \cdot \Psi(x, t),$$

по форме совпадающее с уравнением Шредингера для одночастичной волновой функции (а не оператора) в приближении самосогласованного поля (обратим внимание еще один раз: полученное уравнение движения для оператора уничтожения $\Psi(x, t)$ в гейзенберговском временном представлении является точным; по форме же оно совпадает с таким приближенным уравнением движения для одночастичной волновой

функции в шредингеровском временном представлении, в котором волновая функция N -тельной системы аппроксимируется произведением N таких одночастичных функций, что и составляет основу так называемого приближения Хартри—Фока в нерелятивистской квантовой теории многих тел).

На этом внешнем совпадении часто строят процедуру «рационализированного» введения представления вторичного квантования, связанного с «квантованием» уже самого свободного поля волновой функции (т. е. ψ -поля идеальной системы, когда $\Phi(1, 2) = 0$ и интегральный член в последнем уравнении отсутствует). Отсюда и терминология — «вторичное» квантование («первичное» же квантование — это сопоставление свободному движению частицы волновой функции, например плоской волны $\varphi_k(x)$).

При этом «превращение» одночастичной волновой функции в оператор, действующий в пространстве чисел заполнения, определяющих базисные функции пространства состояний многотельной системы, т. е. подчинение амплитуд свободного поля ψ_p перестановочным соотношениям известного уже нам типа, связывают для наглядности с подчинением этих амплитуд (играющих теперь роль «координат» поля) и канонически им сопряженных «импульсов», определяемых через соответствующие производные от лагранжиана свободного поля, стандартным перестановочным соотношениям для координат и импульсов в «первично» квантованной механике, или с какой-либо иной формально эквивалентной процедурой (например, подчинение амплитуд свободного поля уравнению движения $\dot{\psi}_p = \frac{i}{\hbar}[H, \psi_p]_-$ или представление гамильтониана в форме, совпадающей с гамильтонианом гармонического осциллятора, в котором роли координаты и импульса играют комбинации $\psi_p + \psi_p^+$ и $i(\psi_p - \psi_p^+)$, и т. д.).

Все эти вполне «наглядные» и исторически оправданные варианты (1927–1932 гг. и далее) введения представления вторичного квантования, как и часто используемый прямой аксиоматический прием введения операторов рождения и уничтожения, в результативном отношении, конечно, эквивалентны: все они дают одно и то же представление операторов динамических величин через операторы рождения и уничтожения, подчиненные определенным перестановочным соотношениям бозе- или ферми-типа, которое служит уже отправным моментом дальнейшего исследования систем многих тел и решения интересующих нас прикладных вопросов.

Рассмотренная нами процедура введения представления вторичного квантования не основывается на подобных аналогиях и дополнительных аксиомах, и поэтому само «вторичное квантование» не выглядит дополнительно вводимым в теорию понятием или дополнительной «гипотезой» квантовой теории.

Отметим, что уравнение движения для оператора уничтожения можно было записать и в импульсном представлении, т. е. для оператора

$$a_p(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} a_p e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}.$$

Вычисляя коммутаторы оператора a_p с операторами кинетической энергии частиц H_0 , внешнего поля U и энергии взаимодействия частиц друг с другом H_1 ,

$$\begin{aligned} [a_p, H_0]_- &= \frac{p^2}{2m} a_p; \\ [a_p, U]_- &= \frac{1}{V} \sum_q u(q) a_{p+q}; \\ [a_p, H_1]_- &= \frac{1}{V} \sum_q \nu(q) \sum_{p'} a_{p'+q}^+ a_{p'} a_{p+q}, \end{aligned}$$

мы получим уравнение (полностью эквивалентное уравнению для операторной волновой функции $\Psi(x, t)$)

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial a_p(t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} a_p(t) + \frac{1}{V} \sum_q u(q) a_{p+q}(t) + \frac{1}{V} \sum_q v(q) \sum_{p'} a_{p'+q}^+(t) a_{p'}(t) a_{p+q}(t),$$

аналогия которого со стандартным уравнением Шредингера в «приближении самосогласованного поля» усматривается уже не сразу. К этому уравнению мы еще вернемся в связи с приложениями теории.

м) Волновые функции и базис

Базисные функции $|\dots N_f \dots\rangle$, построенные нами на основе комбинаций плоских волн $\varphi_k(x)$, являются собственными функциями гамильтониана N -частичной системы только в случае $H = H_0$ и $U = 0$, т. е. только для идеальной невозмущенной внешним полем системы. Так как в других случаях, когда учет взаимодействия частиц друг с другом H_1 является обязательным элементом исследования статистической системы, собственные функции полного гамильтониана не известны, и нам по необходимости приходится использовать методы теории возмущений, которые в той или иной форме строятся на базе точно решаемой идеальной системы. Именно, в качестве нулевого приближения используются известные результаты, полученные для идеального газа ферми- или бозе-типа, а средние значения, определяющие следующие за нулевым приближением поправки в виде рядов по степеням входящей в H_1 интенсивности взаимодействия частиц друг с другом, рассчитываются с помощью также известных волновых функций нулевого приближения.

Эволюция вектора состояния $\Phi(t)$, компоненты которого представляют собой коэффициенты разложения волновой функции $\Psi(X, t)$ исследуемой системы по используемому в качестве базиса собственным функциям N -частичной идеальной системы того же ферми- или бозе-типа $\Psi_\xi(X) = \Psi_{\{N_f\}}(x_1, \dots, x_N)$,

$$\Psi(X, t) = \sum_{\xi} \Phi(\xi, t) \Psi_{\xi}(X); \quad \Phi(t) = \{\Phi(\xi, t)\},$$

конечно же важна при рассмотрении кинетических явлений, происходящих на различных стадиях в квантовых статистических системах. Эти исследования, отправным моментом которых является временная квантово-механическая теория возмущений, в результате специфики релаксационных процессов, происходящих в статистических системах, достаточно быстро переходят в кинетическую стадию (характеризуемую уже не волновой функцией $\Phi(t)$, а вероятностями переходов и функциями распределения) и еще далее, когда неравновесное состояние системы начинает описываться уже локальными термодинамическими переменными. Описание этих релаксационных процессов составляет один из наиболее сложных разделов статистической физики уже на уровне исследования классических систем (см. т. 3, гл. 5), при изучении же тех явлений, в которых существенны квантовые эффекты, подобное рассмотрение успешно реализуется лишь в редких случаях.

В равновесной теории, включая теорию стационарных слабобравновесных состояний и явлений переноса, основная проблема, как мы покажем в дальнейшем, оказывается решенной, если удастся рассчитать (точно или в каком-либо приближении) среднее значение, записанное через шпур от операторной структуры с гиббсовским фактором $\tilde{\rho} = e^{-H/\theta}$, а так как результат операции $\text{Sp} \{A\tilde{\rho}\}$ не зависит от используемого представления, то выбор базиса из собственных функций оператора H_0 становится в практическом отношении не только актуальным, но и единственно возможным.

Если у нас возникнет необходимость использовать в каких-либо расчетах явный вид базисных функций $\Psi_\xi(X)$, то целесообразнее представлять их не в виде громоздких детерминантов или симметризованных произведений (т. е. в традиционном импульсном или координатном представлении) и даже не в виде бесконечных произведений конструкций из Δ -функций (т. е. в представлении чисел заполнения, что уже к нам ближе), а с помощью операторов рождения и уничтожения (т. е. в «представлении» вторичного квантования), что оказывается достаточно несложно и вполне наглядно. Покажем, как это можно сделать на примере функций, характеризующих квантовые состояния идеального ферми-газа (аналогично рассматривается и бозе-случай, см. гл. 4, § 2).

Представим себе состояние системы, когда внутри объема V нет ни одной ферми-частицы, и обозначим это «вакуумное» состояние символом $|0\rangle$. С точки зрения представления чисел заполнения это случай, когда все числа N_p равны нулю, что может быть изображено как бесконечная последовательность нулей или бесконечное произведение $\Delta(N_p)$

$$|0, 0, \dots\rangle \quad \text{или} \quad \prod_p \Delta(N_p)$$

(напомним, что в ферми-случае у нас установлен порядок следования величин p : $p_1 < p_2 < \dots < p_F < \dots$). Полагая эти состояния нормированными, $\langle 0|0\rangle = 1$, по определению, отметим основное свойство «вакуумного» состояния: так как отрицательных чисел заполнения не бывает, то

$$a_p|0\rangle = 0 \quad \text{для всех } p.$$

Заполненную сферу Ферми (основное состояние системы из N ферми-частиц) теперь можно изобразить как

$$|F\rangle = \prod_{|p| \leq p_F} \Delta(1 - N_p) \cdot \prod_{|p'| > p_F} \Delta(N_{p'})$$

или в представлении вторичного квантования

$$|F\rangle = \left(\prod_{|p| \leq p_F} a_p^+ \right) |0\rangle.$$

Эта функция нормирована. Действительно, так как в этом произведении все значения $p = (p, \sigma)$ разные, то

$$\langle 0|a_p a_p^+|0\rangle = \langle 0|1 - a_p^+ a_p|0\rangle = \langle 0|1|0\rangle = 1,$$

$$\langle 0|a_{p_1} a_{p_2} a_{p_2}^+ a_{p_1}^+|0\rangle = \langle 0|a_{p_1} a_{p_1}^+ a_{p_2} a_{p_2}^+|0\rangle = \langle 0|(1 - a_{p_1}^+ a_{p_1})(1 - a_{p_2}^+ a_{p_2})|0\rangle = 1$$

и т. д. (в случае $p_1 = p_2$ во второй строчке мы имели бы $a_{p_1}^+ a_{p_1}^+|0\rangle = 0$). Так как

$$a_p^+ a_p|F\rangle = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |p| \leq p_F, \\ 0 & \text{в случае } |p| > p_F, \end{cases}$$

то энергия основного состояния определяется известной формулой

$$E_0 = \langle F| \sum_{p'} \frac{p'^2}{2m} a_{p'}^+ a_{p'} |F\rangle = \sum_{p \leq p_F} \frac{p^2}{2m} = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m} 4\pi p^2 dp = N \cdot \frac{3}{5} \varepsilon_F,$$

где величина импульса Ферми p_F (и граничной энергии $\epsilon_F = p_F^2/(2m)$) определяется из условия N -частичности системы (см. т. 2, гл. 2, § 2)

$$N = \langle F|N|F \rangle = \langle F| \sum_p a_p^+ a_p |F \rangle = \sum_{p \leq p_F} 1 = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{4}{3} \pi p_F^3.$$

Простейшее возбужденное состояние системы — это «выход» одной частицы из состояния с импульсом $|\mathbf{p}| < p_F$, находящимся внутри заполненной сферы Ферми, наружу с импульсом $|\mathbf{p} + \mathbf{q}| > p_F$. Функция этого состояния $a_{p+q}^+ a_p |F \rangle$, естественно, нормирована,

$$\langle F|a_p^+ a_{p+q} a_{p+q}^+ a_p |F \rangle = \langle F|(1 - a_{p+q}^+ a_{p+q})(1 - a_p a_p^+) |F \rangle = \langle F|1|F \rangle = 1.$$

С ее помощью легко получается само собой разумеющийся результат для энергии этого возбужденного состояния над энергией основного состояния,

$$\begin{aligned} \epsilon_{pq} &= \langle F|a_p^+ a_{p+q} \sum_{p'} \frac{p'^2}{2m} a_{p'}^+ a_{p'} a_{p+q}^+ a_p |F \rangle - E_0 = \\ &= \left(\frac{(\mathbf{p} + \mathbf{q})^2}{2m} + \sum_{p' \leq p_F} \frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} \right) - \sum_{p' \leq p_F} \frac{p'^2}{2m} = \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{q})^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом при необходимости можно рассмотреть и более сложные состояния идеальной «базовой» ферми-системы и определить все их параметры и особенности.

Переходя к бозе-случаю, необходимо отметить, что основное состояние идеального бозе-газа представляет собой «конденсат» в импульсном пространстве: все N частиц системы имеют нулевой импульс, $N_0 = N$ и $N_p = 0$ для всех $p \neq 0$. Такую функцию состояния идеальной бозе-системы можно изобразить в N_p -представлении или с помощью эквивалентной вторично-квантованной конструкции как

$$|N, 0\rangle = \Delta(N_0 - N) \prod_{p \neq 0} \Delta(N_p) \quad \text{или} \quad |N, 0\rangle = \frac{(a_0^+)^N |0\rangle}{\langle 0|(a_0)^N (a_0^+)^N |0\rangle}.$$

Ее основное свойство, решающее проблему расчета матричных элементов по любым функциям идеального бозе-газа, ввиду выделенности значения $p = 0$ запишется как

$$\begin{aligned} a_p |N, 0\rangle &= 0 \quad \text{для всех } p \neq 0; & a_0 |N, 0\rangle &= \sqrt{N} |N, 0\rangle; \\ a_0^+ |N, 0\rangle &= \sqrt{N+1} |N+1, 0\rangle; & a_0^+ a_0 |N, 0\rangle &= N |N, 0\rangle. \end{aligned}$$

Как и в ферми-случае, приведем как бы для проверки выбранных конструкций примитивные примеры таких расчетов, не претендующие на получение каких-либо неожиданных результатов. Так как

$$\langle N, 0|a_p a_0^+ a_0 a_p^+ |N, 0\rangle = \langle N, 0|a_0^+ a_0 (1 + a_p^+ a_p) |N, 0\rangle = \langle N, 0|a_0^+ a_0 |N, 0\rangle = N,$$

то нормированная функция простейшего возбужденного состояния, соответствующая «выходу» одной бозе-частицы из конденсата, будет иметь вид

$$|N-1, p\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} a_p^+ a_0 |N, 0\rangle.$$

Она позволяет определить энергию такого возбуждения над энергией основного состояния $E_0 = \langle N, 0 | H_0 | N, 0 \rangle = 0$,

$$\epsilon_p = \frac{1}{N} \langle N, 0 | a_p a_0^+ \sum_{p'} \frac{p'^2}{2m} a_0 a_p^+ | N, 0 \rangle = \frac{p^2}{2m}$$

(очевидный результат) и т. д.

В дальнейшем мы еще вернемся к исследованию вопроса, как производится учет взаимодействия частиц друг с другом и как строится теория возмущений при рассмотрении вырожденной ферми-системы и системы с выделенным бозе-конденсатом.

н) Теорема о спариваниях

Приведенные выше примеры расчета средних значений — это, конечно, архаика. Расчеты средних значений по состояниям системы, характеризуемой гамильтонианом H_0 идеальной системы (определившей нам рабочий базис в процедуре введения представления вторичного квантования), от любой комбинации операторов рождения и уничтожения теперь производится на базе теоремы, означенной в заголовке данного пункта.

Докажем следующее утверждение:

Среднее значение произведения четного числа операторов рождения и уничтожения, рассчитываемое по смешанному состоянию, определяемому равновесным статистическим оператором

$$\rho = \frac{e^{-\mathcal{H}_0/\theta}}{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}_0/\theta}}$$

(т. е. среднее, рассчитываемое с помощью большого канонического распределения Гиббса для идеального газа), где

$$\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N = \sum_p (E_p - \mu) a_p^+ a_p = \sum_p \epsilon_p a_p^+ a_p$$

и где, в частности, в нерелятивистском случае $E_p = p^2/(2m)$, равно сумме всех возможных полных систем спариваний этих операторов.

В целях разумного сокращения в написании операторов a_p^+ , a_p и энергии ϵ_p в случаях, когда их нижний индекс имеет еще подиндекс вида p_i , p_j , условимся писать просто a_i^+ , a_j и ϵ_i . Учитывая перестановочные соотношения

$$a_i a_j^+ \mp a_j^+ a_i = \Delta(p_i - p_j); \quad a_i a_j \mp a_j a_i = 0$$

и вводя средние величины чисел заполнения для идеальных систем бозе- и ферми-типов

$$n_i = \langle a_i^+ a_i \rangle = \frac{1}{e^{\epsilon_i/\theta} \mp 1},$$

определим спаривания операторов a_p^+ и a_p как средние значения от их парных произведений

$$\begin{aligned} \overline{a_i^+ a_j} &= \langle a_i^+ a_j \rangle = \Delta(p_i - p_j) n_i; \\ \overline{a_i a_j^+} &= \langle 1 \pm a_j^+ a_i \rangle = \Delta(p_i - p_j) (1 \pm n_i); \\ \overline{a_i a_j} &= \langle a_i a_j \rangle = 0; \quad \overline{a_i^+ a_j^+} = \langle a_i^+ a_j^+ \rangle = 0. \end{aligned}$$

Чтобы не писать все по два раза, используем в дальнейших выкладках единое обозначение для операторов вторичного квантования a_i^+ , a_j (которые в литературе часто называют полевыми) и для меняющей знак энергии ε_i

$$A_i = \begin{cases} a_i^+, \\ a_i^- \equiv a_i, \end{cases} \quad E_i = \begin{cases} \varepsilon_i, \\ -\varepsilon_i, \end{cases}$$

помня об их обязательном согласовании: если $A_i = a_i^+$, то $E_i = \varepsilon_i$, если же $A_i = a_i$, то $E_i = -\varepsilon_i$.

Если вспомнить теперь правило перестановки полевых операторов с функцией от числа частиц (см. пп. г) и ж) данной главы), то соотношения

$$a_p e^{-\mathcal{H}_0/\theta} = e^{-\mathcal{H}_0/\theta} e^{-\varepsilon_p/\theta} a_p; \quad a_p^+ e^{-\mathcal{H}_0/\theta} = e^{-\mathcal{H}_0/\theta} e^{\varepsilon_p/\theta} a_p^+$$

можно представить единой формулой

$$A_i e^{-\mathcal{H}_0/\theta} = e^{-\mathcal{H}_0/\theta} e^{-E_i/\theta} A_i$$

так же, как и все четыре результата спариваний

$$\overline{A_i A_j} = \langle A_i A_j \rangle = \frac{[A_i, A_j]_{\mp}}{1 \mp e^{E_i/\theta}},$$

откуда для перестановочных соотношений полевых операторов получаем

$$[A_i, A_j]_{\mp} = (1 \mp e^{E_i/\theta}) \langle A_i A_j \rangle$$

(напомним, что правая часть этого соотношения равна либо нулю, либо $\Delta(p_i - p_j)$).

Рассмотрим теперь среднее от произведения четного числа операторов A_i и перенесем стоящий на последнем месте оператор A_1 вперед на самое первое место. Имеем

$$\begin{aligned} \langle A_2 A_3 \dots A_{2s} A_1 \rangle &= \frac{\text{Sp} \{ A_2 A_3 \dots A_{2s} A_1 e^{-\mathcal{H}_0/\theta} \}}{\text{Sp} e^{-\mathcal{H}_0/\theta}} = \\ &= e^{E_1/\theta} \frac{\text{Sp} \{ A_2 \dots A_{2s} e^{-\mathcal{H}_0/\theta} A_1 \}}{\text{Sp} e^{-\mathcal{H}_0/\theta}} = e^{E_1/\theta} \langle A_1 A_2 \dots A_{2s} \rangle. \end{aligned}$$

Таким образом мы получаем, что среднее значение от коммутации A_1 со всей группой остальных операторов целиком выражается через среднее значение первоначальной их последовательности

$$\langle [A_1, A_2 A_3 \dots A_{2s}]_{\mp} \rangle = (1 \mp e^{E_1/\theta}) \langle A_1 A_2 \dots A_{2s} \rangle.$$

Далее, замечая, что сам рассматриваемый коммутатор или антикоммутатор можно представить в виде суммы, содержащей парные коммутации A_1 с каждым из последующих $2s - 1$ операторов в отдельности, которые мы только что научились выражать через средние значения $\langle A_1 A_i \rangle$ (частный случай последней формулы, когда $s = 1$),

$$\begin{aligned} [A_1, A_2 A_3 \dots A_{2s}]_{\mp} &= [A_1, A_2]_{\mp} A_3 \dots A_{2s} \pm A_2 [A_1, A_3]_{\mp} A_4 \dots A_{2s} + \\ &+ A_2 A_3 [A_1, A_4]_{\mp} A_5 \dots A_{2s} \pm \dots + A_2 A_3 \dots A_{2s-1} [A_1, A_{2s}]_{\mp} = \\ &= (1 \mp e^{E_1/\theta}) \{ \langle A_1 A_2 \rangle A_3 \dots A_{2s} \pm \langle A_1 A_3 \rangle A_2 A_4 \dots A_{2s} + \dots + \langle A_1 A_{2s} \rangle A_2 \dots A_{2s-1} \}. \end{aligned}$$

В результате получаем окончательно для интересующего нас среднего от произведения $2s$ операторов развертку

$$\begin{aligned} \langle A_1 A_2 \dots A_{2s} \rangle &= \sum_{2 \leq n \leq 2s} (\pm 1)^n \langle A_1 A_n \rangle \langle A_2 \dots A_{n-1} A_{n+1} \dots A_{2s} \rangle = \\ &= \overline{A_1 A_2} \langle A_3 A_4 \dots A_{2s} \rangle \pm \overline{A_1 A_3} \langle A_2 A_4 \dots A_{2s} \rangle + \dots + \overline{A_1 A_{2s}} \langle A_2 A_3 \dots A_{2s-1} \rangle, \end{aligned}$$

в которой $2s - 1$ слагаемых, содержащих средние от произведений уже $2s - 2$ операторов, каждое из которых разворачивается по тому же рецепту в сумму из $2(s - 1) - 1$ слагаемых, включающих средние от произведений $2s - 4$ операторов и т. д., т. е. всего в системе полных спариваний, уже не содержащих средних от трех и более операторов, а только произведения одних спариваний, будет $1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2s - 1)$ слагаемых. Среди них много равных нулю: число операторов a^+ и a должно быть одинаково и равно s . Ненулевые спаривания — это $\overline{a^+ a}$ и $\overline{a a^+}$, поэтому в первой сумме (с одним спариванием) только $s - 1$ слагаемых со средними от $s - 1$ операторов a^+ и столько же a , каждое из которых дает $(s - 1) - 1 = s - 2$ слагаемых и т. д. Таким образом, в живых может остаться не более $1 \cdot 2 \dots s = s!$ слагаемых, состоящих из произведений s спариваний. Среди них еще могут быть нулевые спаривания, связанные с появлением $\Delta(p_i - p_j)$ в спариваниях операторов с несовпадающими индексами. Поэтому максимальное число $s!$ слагаемых может быть в данной развертке по спариваниям только в том случае, когда все p_i равны друг другу, $p_1 = p_2 = \dots = p_s$, и в ферми-случае два одинаковых оператора в усредняемом произведении не стоят рядом друг с другом.

Остается еще правило знаков, которое в формулировке теоремы не отмечено и которое актуально только при рассмотрении ферми-систем (т. е. произведений антикоммутирующих операторов), так как связано непосредственно с четностью перестановок первого оператора в усредняемом их произведении последовательно со следующими за ним (в графической интерпретации это правило, как мы увидим на примерах, учитывается достаточно элементарно).

Чтобы посмотреть, как на практике «работает» доказанная выше теорема о спариваниях, обратимся к двум простым примерам.

Первый — это расчет дисперсии чисел заполнения в идеальных системах. Имеем

$$\langle N_p^2 \rangle = \langle a_p^+ a_p a_p^+ a_p \rangle = \overline{a_p^+ a_p a_p^+ a_p} + \overline{a_p^+ a_p a_p^+ a_p} = n_p^2 + n_p(1 \pm n_p),$$

откуда для дисперсии чисел заполнения получаем известный результат

$$(\Delta N_p)^2 = \langle N_p^2 \rangle - \langle N_p \rangle^2 = n_p(1 \pm n_p).$$

Второй пример — расчет первой поправки к внутренней энергии идеального ферми-газа, учитывающей парное взаимодействие частиц друг с другом. Имеем, учитывая только ненулевые спаривания,

$$\begin{aligned} \Delta \mathcal{E}_1 = \langle H_1 \rangle &= \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_{pp'} \langle a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p \rangle = \\ &= \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_{pp'} (\overline{a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p} + \overline{a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p}). \end{aligned}$$

Так как во втором слагаемом имеется одна точка пересечения линий спариваний (или, что то же, требуется одна перестановка операторов, чтобы этого пересечения

не было), то перед ним появляется множитель (-1) в степени числа пересечений линий спаривания (в бозе-случае этого правила, конечно, нет), и мы получаем, учитывая наличие Δ -функций по импульсам в обозначенных спариваниях,

$$\langle H_1 \rangle = \sum_{pp'} \frac{\nu(0)}{2V} n_p n_{p'} - \sum_{qp} \frac{\nu(q)}{2V} n_{p+q} n_p = \frac{N^2}{2V} \nu(0) - \sum_{qp} \frac{\nu(q)}{2V} n_{p+q} n_p.$$

Первое слагаемое в полученном выражении для $\langle H_1 \rangle$ ассоциируется в электронной теории с учетом прямого кулоновского взаимодействия ($\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$) как бы равномерно размазанных с плотностью $n = N/V$ по системе частиц,

$$\frac{1}{2} \int_{(V)} \frac{en \, d\mathbf{r}_1 \cdot en \, d\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{N^2}{V^2} \cdot V \int \Phi(R) \, d\mathbf{R} = \frac{N^2}{2V} \nu(0) = N \frac{n\nu(0)}{2},$$

второе же обычно называют обменным взаимодействием.

Так как сам оператор H_1 мы интерпретировали в пункте и) графическими элементами, то естественно продолжить подобную наглядную интерпретацию, сопоставив спариваниям операторов рождения с операторами уничтожения сплошные линии с сохранением единого направления стрелок и значения импульса (называемых обычно линиями частиц в отличие от пунктирных линий взаимодействия, означающих в нашем случае множитель $\nu(q)/(2V)$), соединяющие выходящие и входящие концы линий в изображении отдельных слагаемых оператора H_1 . Тогда полученный выше для $\langle H_1 \rangle$ результат может быть представлен двумя диаграммами рис. 2, причем знак перед вкладом от каждой из изображенных на этом рисунке систем спариваний определяется (естественно, только в ферми-случае) четностью числа замкнутых в них петель, образованных линиями частиц.

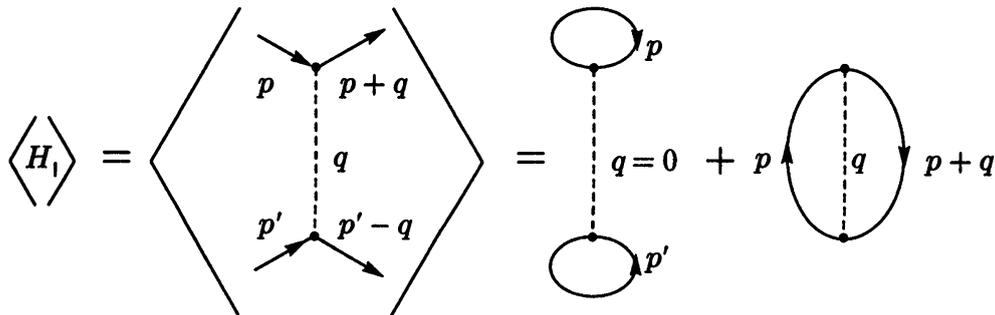


Рис. 2. Диаграммное изображение среднего по состояниям идеальной системы значения от оператора взаимодействия частиц друг с другом

Приведенные выше графические представления систем спариваний являются, конечно, лишь зачаточными элементами диаграммной техники термодинамической теории возмущений, т. е. теории, рассчитывающей поправки к термодинамическим характеристикам равновесных идеальных систем в виде рядов по степеням константы взаимодействия частиц друг с другом, в которой каждому подчас громоздкому интегральному выражению взаимно однозначно сопоставляется простая и вполне наглядная диаграмма.

Не приводя более примеров полного расчета средних значений, остановимся еще на одном важном вопросе, непосредственно связанном с теоремой о спариваниях. Речь идет о том, какого порядка по числу частиц N (или по объему системы $V = vN$) окажется среднее значение от произведения операторов H_1 . Этот вопрос тем более

актуален в связи с тем, что в предыдущей главе для той части термодинамического потенциала Ω , которая учитывает взаимодействие частиц друг с другом, мы получили выражение

$$\Delta\Omega(\theta, V, \mu) = \Omega(\theta, V, \mu) - \Omega_{\text{ид}}(\theta, V, \mu) = -\theta \ln \langle S(\beta) \rangle,$$

где оператор $S(\beta) = e^{\beta \mathcal{H}_0} \cdot e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + H_1)}$, $\beta = 1/\theta$, представляется в виде ряда теории возмущений по степеням H_1 ,

$$S(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T(H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n)).$$

Рассмотрим среднее от произведения n операторов H_1 . Это среднее включает $3n$ операций суммирования по импульсам и множитель $1/V$ перед каждым H_1 , таким образом возникает общая степень числа N , равная $3n - n = 2n$. Произведение n операторов H_1 содержит $2n$ пар операторов рождения и уничтожения, т. е. при расчете среднего с помощью теоремы о спариваниях образуется $2n$ линий спариваний, несущих Δ -функции по импульсам. Если система спариваний образует единую не разделяющуюся на части диаграмму (так называемую «связную» диаграмму), то в силу общего сохранения импульса в произведении операторов H_1 появление $2n$ Δ -функций снимет только $2n - 1$ суммирование по импульсам, и общий вклад от такой диаграммы (от такой системы спариваний) будет пропорционален первой степени N . Если же полная система спариваний распадается на две отдельные системы, содержащие по n_1 и n_2 операторов H_1 ($n_1 + n_2 = n$), т. е. в графическом выражении на две отдельные диаграммы, не соединяющиеся линиями спариваний, то в силу только что сказанного каждая часть такой двухсвязной диаграммы будет пропорциональна N , а общий вклад уже будет пропорционален N^2 и т. д. Таким образом, среднее значение от произведения n операторов H_1 будет содержать вклады, пропорциональные N^1 от односвязных диаграмм, N^2 от двухсвязных, ..., N^n от комбинаций n -связных диаграмм, представленных, кстати, на рис. 2.

Величина $\Delta\Omega$, про которую мы знаем заранее, что она, как аддитивная термодинамическая величина, пропорциональна только первой степени N , определяется логарифмом от бесконечного ряда, представляющего величину $\langle S(\beta) \rangle$, который содержит любые степени H_1 и, следовательно, любые степени N . Не занимаясь словесными рассуждениями на комбинаторные темы, проследим на примере первых трех порядков термодинамической теории возмущений, как конкретно компенсируются в этом двойном разложении члены с нефизической зависимостью от общего числа частиц N .

Обозначим $x_1 = a + b$ рассчитанный нами вклад от $\langle H_1 \rangle$, изображенный на рис. 2 в виде двух односвязных диаграмм, в связи с чем $\langle H_1 \rangle \sim N^1$. Во втором порядке среднее $x_2 = \langle H_1 H_1 \rangle$ уже будет содержать пять видов топологически различных односвязных диаграмм (20 систем спариваний, изображенных на рис. 3), вклад от которых A_2 пропорционален N^1 , и четыре двухсвязных диаграммы, состоящих из элементов a и b и пропорциональных уже N^2 .

Среднее $x_3 = \langle H_1^3 \rangle$ будет включать в себя вклады от односвязных диаграмм A_3 (читатель при желании может их нарисовать самостоятельно), от двухсвязных конструкций, представляющих собой каждую из диаграмм группы A_2 со вставленными в нее тремя способами (впереди, в середине и сзади) отдельными элементами a и b , и от трехсвязных диаграмм, состоящих из элементов a и b и образующих $(a + b)^3$.

Таким образом, получаем

$$x_3 = A_3 + A_2(3a + 3b) + (a + b)^3 = A_3 + 3A_2x_1 + x_1^2$$

и т. д.

Теперь разложим до третьего порядка по H_1 величину $\ln \langle S(\beta) \rangle$, учитывая множители $(-1)^n/n!$ перед каждым x_n . Тогда, подставив «разложение» по степеням N величины x_2 и x_3 , получим

$$\begin{aligned} \ln \left(1 - x_1 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{6}x_3 + \dots \right) &= -x_1 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{1}{6}x_3 - \frac{1}{2} \left(x_1 - \frac{1}{2}x_2 \right)^2 - \frac{1}{3}x_1^3 + \dots = \\ &= -x_1 + \frac{1}{2}A_2 + \frac{1}{2}x_1^2 - \frac{1}{6}A_3 - \frac{1}{2}A_2x_1 - \frac{1}{6}x_1^3 - \frac{1}{2}x_1^2 + \frac{1}{2}x_1A_2 + \frac{1}{2}x_1^3 - \frac{1}{3}x_1^3 + \dots, \end{aligned}$$

откуда следует, что

$$\ln \langle S \rangle = -x_1 + \frac{1}{2}A_2 - \frac{1}{6}A_3 + \dots,$$

т. е. все нефизические зависимости потенциала Ω от N полностью скомпенсировались, и мы получаем рабочую формулу термодинамической теории возмущений в окончательном виде

$$\Delta\Omega(\theta, V, \mu) = \Omega(\theta, V, \mu) - \Omega_{\text{ид}}(\theta, V, \mu) = -\theta \sum_{n=1}^{\infty} \langle S_n(\beta) \rangle_{\text{связ}},$$

где нижний значок означает, что это разложение содержит вклады только от одно-связных диаграмм.

Чтобы закончить данный пункт, необходимо сделать по отношению ко всему изложенному здесь материалу еще два существенных замечания.

Во-первых, доказанная теорема о спаривании называется теоремой Блоха и Доминисиса (С. Bloch, S. de-Dominicis, 1958), а иногда и теоремой (или статистической теоремой) Вика. Собственно говоря, теорема Вика (G. Wick, 1950) — это все же нечто иное: «произведение полевых операторов рождения и уничтожения равно сумме всех соответствующих нормальных произведений со всевозможными спариваниями, включая нормальное произведение без спариваний и полную систему всех возможных спариваний этих операторов» (спаривание в квантовой теории поля определяется как среднее по вакуумному состоянию от данной пары операторов), т. е. теорема определяет операторные соотношения, связанные с перестройкой первоначально заданной последовательности операторов рождения и уничтожения. Конечно, если определить нормальное произведение полевых операторов так, чтобы средние значения от них равнялись бы нулю (например, так, чтобы операторы уничтожения стояли бы последними, тогда их действие на «вакуумное состояние» $|0\rangle$, по которому производится усреднение, давало бы нулевой результат $a_p|0\rangle = 0$), то от теоремы Вика после такого усреднения останется только сумма всех возможных полных систем спариваний усредняемого произведения операторов. Это, конечно, сближает квантово-полевою теорему Вика со статистической теоремой Блоха и Доминисиса, доводя это сближение до совпадения только в пределе $\theta = 0$.

Во-вторых, доказанная теорема верна для выражения средних от произведения операторов a^+ и a через произведения средних чисел заполнения n_p и $(1 \pm n_p)$ в случаях, когда эти средние рассчитываются по равновесным состояниям идеального ферми-газа. В случае идеального бозе-газа она верна только для всех $p \neq 0$, так как среднее значение числа заполнения с нулевым импульсом

$\langle N_0 \rangle = \langle a_0^+ a_0 \rangle = N(1 - (\theta/\theta_0)^{3/2})$ в вырожденном случае $\theta < \theta_0$ не имеет той стандартной экспоненциальной бозе-структуры, которая была существенно использована при доказательстве теоремы (не говоря уже о том, что величины $\langle N_0 \rangle \sim N$ и $n_p \sim N^0 = 1$ имеют разный асимптотический порядок по N). В том, что для операторов с $p = 0$ теорема о спариваниях не имеет места, можно убедиться, обратившись к простому примеру: для идеального бозе-газа при $\theta = 0$, когда $N_0 = N$ и все остальные числа заполнения $N_p = 0$, возможен прямой квантово-механический расчет среднего от четырех операторов, образующих величину $\langle N_0^2 \rangle$,

$$\langle a_0^+ a_0 a_0^+ a_0 \rangle = N_0^2 = N^2,$$

в то время как согласно теореме Вика (вырожденной теореме Блоха и Доминисиса) это среднее должно было равняться величине

$$\langle \overbrace{a_0^+ a_0}^{\overbrace{a_0^+ a_0}} \rangle = N_0(N_0 + 1) + N_0^2 = 2N_0^2 + N_0 \stackrel{\text{as}}{=} 2N^2.$$

Разница в два раза будет особенно впечатлять, если связать ее с результатом для дисперсии числа конденсатных частиц,

$$\langle (\Delta N_0)^2 \rangle = \langle N_0^2 \rangle - \langle N_0 \rangle^2 = 0 \text{ — точный результат,}$$

$$\langle (\Delta N_0)^2 \rangle = 2N^2 + N - N^2 = N^2 + N \stackrel{\text{as}}{=} N^2 \text{ — результат, следующий из теоремы Вика.}$$

Таким образом, при рассмотрении вырожденных бозе-систем необходимо сразу выделять в усредняемых операторных структурах операторы a_0^+ и a_0 , отделив их от остальных, по отношению к которым справедлива теорема Блоха и Доминисиса. Без выделения «конденсатных» операторов теоремой о спариваниях в бозе-случае можно пользоваться лишь при температурах $\theta > \theta_0$, когда макроскопического бозе-конденсата в системе уже нет и когда специфические особенности бозе-системы отходят в разряд квантовых поправок к известным классическим результатам.

о) Вторичное квантование в случае неоднocomпонентных систем

Предыдущее рассмотрение относилось к системам, состоящим из одинаковых частиц. Обобщение этого рассмотрения на случай нескольких компонент (нам хватит и двух) несложно. Базис двух вложенных друг в друга идеальных систем, каждая из которых может быть или бозевской, или фермиевской, представляется произведением индивидуальных базисов. Представление чисел заполнения, характеризующее состояние этих систем, определяется набором чисел заполнения двух сортов, подчиненных условиям « N -частичности»

$$\sum_{f_1} N_{f_1} = N_1; \quad \sum_{f_2} N_{f_2} = N_2,$$

операторы, изменяющие эти числа на единицу (операторы рождения и уничтожения) тоже будут двух сортов, причем, операторы различного сорта вне зависимости от того, являются ли они операторами рождения или уничтожения, естественно, коммутируют друг с другом,

$$[a_{f_1}^{(+)}, A_{f_2}^{(+)}]_- = 0,$$

а по отношению друг к другу подчинены перестановочным соотношениям соответственно бозевского или фермиевского типа. Так что практически все изложенное

в предыдущих пунктах повторяется, операторы H_0 , U и H_1 для каждого из компонентов в представлении вторичного квантования имеют тот же вид, что и определенный нами в пункте и), новым является лишь представление оператора взаимодействия частиц разного сорта

$$H_{12} = \sum_{1 \leq i \leq N_1} \sum_{1 \leq j \leq N_2} \Phi_{12}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|).$$

Обозначив $\nu_{12}(q)$ фурье-образ потенциала взаимодействия $\Phi_{12}(R)$, запишем сразу этот оператор в представлении вторичного квантования, используя его аналогично с оператором взаимодействия частиц с внешним полем $U(\mathbf{r})$, только теперь импульс отдачи q берет на себя не «бесконечно тяжелый» источник внешнего поля, а частицы второй компоненты, создающие действующее на частицы первого сорта силовое поле Φ_{12} (см. рис. 4),

$$H_{12} = \frac{1}{V} \sum_q \sum_{pp'} \nu_{12}(q) a_{p+q}^+ a_p A_{p'-q}^+ A_{p'} = \frac{1}{V} \sum_q \nu_{12}(q) \rho_q^{(1)} \rho_{-q}^{(2)}.$$

Отметим также, что теорема о спариваниях справедлива по отношению к операторам каждой из компонент в отдельности без «пересечений», так как смешанные спаривания в любых вариантах равны нулю, $\overline{aA} = 0$.

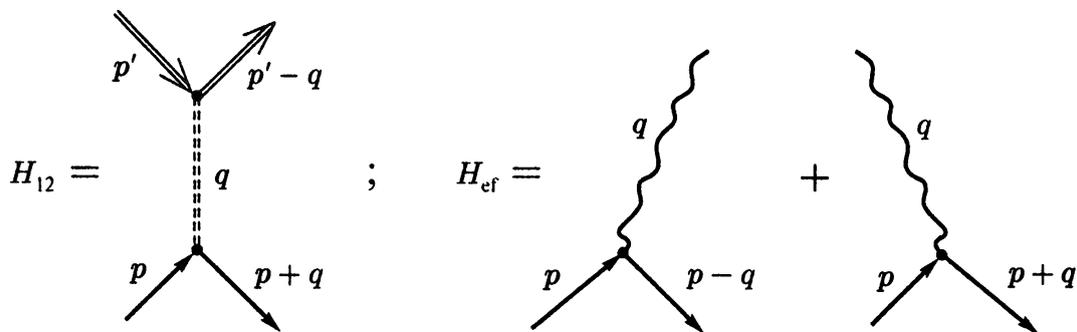


Рис. 4. Графическое изображение операторов H_{12} и H_{ef} во вторично-квантованном представлении. Двойные линии означают операторы A^+ и A , одинарные — a^+ и a , волнистые линии — операторы рождения и уничтожения фононов b^+ и b , двойной пунктир — взаимодействие $\nu_{12}(q)/V$, точки входа и выхода линий фононов — амплитуду электрон-фононного взаимодействия $\Phi(q)/\sqrt{V}$

Остановимся еще на одном характерном варианте взаимодействия квантового поля рассматриваемых частиц с полем других. В электронной теории металлов помимо кулоновского взаимодействия частиц друг с другом при рассмотрении ряда физических проблем существенным оказывается учет взаимодействия электронов с колебаниями кристаллической решетки, в которой этот газ электронов находится. Так, используя матричное квантово-механическое описание гармонических возбуждений кристалла, Ф. Блоху (F. Bloch, 1928) удалось выявить это взаимодействие в аналитическом выражении, что дало ему возможность построить в общих чертах теорию явлений переноса для вырожденного электронного газа (см. т. 3, гл. 5, § 7, п. в)).

В рамках дебаевской идеологии колебания в трехмерной кристаллической решетке ассоциируются с плоскими волнами, которым сопоставляются возбужденные состояния этой решетки — фононы, что с физической точки зрения находит свое оправдание для длинноволновой (т. е. низколежащей) части спектра таких возбуждений (см. т. 2, гл. 2, § 4, п. б)). Более того, именно в длинноволновом диапазоне, когда возникшая волна колебаний узлов решетки не сопровождается одновременным

появлением волны электростатического поля, плотность отрицательно заряженного электронного газа по всей длине этой волны равна плотности положительно заряженных ионов решетки (т. е. в отношении электронного газа реализуется так называемое адиабатическое приближение, когда время релаксации плотности газа легких электронов по отношению к изменению расположения ионов решетки значительно меньше периода колебаний последних) и в системе не возникает объемных электрических зарядов, появление фонона — колебания положительно заряженных ионов кристаллической решетки металла — сопровождается скомпенсированным колебанием плотности электронного газа.

Таким образом, каждый родившийся фонон с импульсом q (оператор рождения бозе-типа b_q^+) должен в операторе взаимодействия электронного газа с колебаниями решетки определять вклад, включающий операторную конструкцию $b_q^+ \rho_q^+ = b_q^+ \rho_{-q}$, где ρ_q — оператор фурье-компоненты плотности электронного газа (сопряженная конструкция $b_q \rho_q$ соответствует одновременному исчезновению фонона и волны плотности электронного газа). Несмотря на то, что амплитуда $\Phi(q)$, характеризующая интенсивность взаимодействия волн плотности узлов решетки и электронного газа, еще не определена, общая операторная структура гамильтониана электрон-фононного взаимодействия уже вполне ясна (графически этот гамильтониан в принятой нами манере представлен на рис. 4)

$$H_{ef} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q \Phi(q) (b_q^+ \rho_q^+ + b_q \rho_q) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{qp} \Phi(q) (b_q^+ a_{p-q}^+ a_p + b_q a_{p+q}^+ a_p).$$

Эта структура фактически совпадает с той, которая является основной в описании взаимодействия электронов с электромагнитным излучением в квантовой электродинамике. У нас же существенно нерелятивистская теория, и амплитуда электрон-фононного взаимодействия определяется не из уравнений Максвелла, а из общефизических представлений. Чтобы покончить с этим вопросом, напомним их вкратце (см. более подробно т. 3, гл. 5, § 7, п. 4, с. 341).

Если представить волну отклонений узлов одноатомной решетки от положений их равновесия в виде стандартной экспоненты

$$\xi_q(\mathbf{r}, t) = A b_q^+ e^{-i\omega t + \frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}}$$

и учесть, что волна расстояний между узлами связана с ней операцией градиента (так как $(\Delta \xi_q)_\alpha = \xi_q(\mathbf{r}_\alpha + \mathbf{a}_\alpha) - \xi_q(\mathbf{r}_\alpha) = a_\alpha \partial \xi_q / \partial r_\alpha$, $\alpha = x, y, z$), то энергия такой отдельной ($b_q^+ b_q = N_q = 1$) волны, включающая учет кинетической энергии узлов и потенциальной энергии деформированных межатомных расстояний, в гармоническом приближении представится в виде

$$E_q = \int_{(V)} \frac{Mn}{2} \left(\frac{\partial \xi_q}{\partial t} \right)^2 d\mathbf{r} + \int_{(V)} \frac{\kappa}{2} \left(\frac{\partial \xi_q}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 d\mathbf{r},$$

где M — масса узла решетки, n — плотность числа узлов, κ — константа упругости. Если мы свяжем эту величину с энергией фонона $\hbar\omega = cq$, где $c^2 = \kappa/(nM)$, то, взяв написанные выше интегралы и сохранив в результате все характеризующие это колебание параметры, мы получим

$$\hbar\omega = \text{const} \cdot Mn\omega^2 VA^2,$$

что сразу дает возможность с точностью до константы определить зависимость амплитуды A от этих параметров.

Интересуясь в связи со сказанным нами ранее возмущаемой наличием в системе колебания $\xi_q(\mathbf{r}, t)$ волной отклонения плотности узлов решетки $n_q(\mathbf{r}, t)$ от невозмущенного значения n , $n_q(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) - n \ll n$, амплитуда которой пропорциональна градиенту $\partial \xi_q / \partial \mathbf{r}$, получаем для этой волны с точностью до множителя

$$n_q(\mathbf{r}, t) = \text{const} \sqrt{\frac{q}{VnMc}} (b_q^+ e^{-i\omega t + \frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \text{к. с.}).$$

Определяя теперь энергию взаимодействия электронного газа с возникшим колебанием решетки $\xi_q(\mathbf{r}, t)$ в соответствии с приведенной нами выше физической интерпретацией как

$$H_q = \text{const} \int_{(V)} \rho(\mathbf{r}) n_q(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r},$$

представляя плотность электронного газа $\rho(\mathbf{r})$ в виде разложения по фурье-гармоникам (см. п. и))

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{q'} \rho_{q'} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}}$$

и учитывая, что

$$\frac{1}{V} \int_{(V)} e^{\frac{i}{\hbar} (\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \Delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}'),$$

получаем

$$H_q = \gamma \sqrt{\frac{q}{VnMc}} (\rho_q^+ b_q^+ + \rho_q b_q),$$

где константа взаимодействия γ , определяющая интенсивность электрон-фононного взаимодействия, включает в себя e^2 , особенности решетки и т. д. Суммируя по всем \mathbf{q} и разворачивая оператор ρ_q через операторы рождения и уничтожения электронной компоненты, получаем окончательно

$$H_{\text{ef}} = \sum_{pq} \gamma \sqrt{\frac{q}{VnMc}} (a_{p-q}^+ a_p b_q^+ + a_{p+q}^+ a_p b_q).$$

Этот гамильтониан, который, естественно, должен быть дополнен гамильтонианами свободных электронов и газа фононов

$$H_0 = \sum_p E(p) a_p^+ a_p + \sum_q \hbar \omega(q) b_q^+ b_q,$$

называют гамильтонианом Фрелиха (H. Fröhlich, 1950), хотя он полностью соответствует идеям матричного подхода Блоха (F. Bloch, 1928–1930). Структура амплитуды $\Phi(q) = \gamma \sqrt{q/(nMc)}$, полученная из общих соображений и описывающая электрон-фононное взаимодействие лишь в общих чертах, оправдала себя в качественном объяснении изотопического эффекта, связанного с зависимостью $\Phi(q)$ от M , температурного поведения проводимости и теплопроводности вырожденного электронного газа, связанного с зависимостью $\Phi(q)$ от q , в разных диапазонах температур и т. д. Эта

модель, конечно, не учитывает всех деталей и различных механизмов электрон-решеточного взаимодействия, и с целью улучшения совпадений с экспериментальными данными эту функцию видоизменяют (например, изменяют степень зависимости от импульса q) уже на чисто феноменологическом уровне.

Заметим, наконец, что приведенная выше форма учета электрон-фононного взаимодействия, так же как и рассмотренные нами ранее выражения для операторов H_1 и U , физически оправданы, что является их несомненным достоинством в отличие от ряда модельных и подчас формальных схем, призванных обойти математические трудности, возникающие при прямом использовании «физических» конструкций операторов H_1 , H_{ef} и т. д. в статистических расчетах, и тем облегчить получение желаемых макроскопических результатов методами статистической механики.

п) Общие замечания: достижения и трудности

Заметим прежде всего, что если в 1927–1930 гг. процедура вторичного квантования казалась чуть ли не экзотическим добавлением к сложившемуся к этому времени аппарату квантовой механики, то теперь использование представления вторичного квантования в самых разнообразных исследованиях квантово-механических систем является общепринятой нормой. Квантовая теория поля (в широком понимании) просто немыслима без представления вторичного квантования. Именно в ней этот метод зародился и стал широко использоваться, что позволило оперировать в основном не с «частицами», а с соответствующими им квантами полей различного типа.

В статистической физике, конечно, тоже рассматриваются квантующиеся поля — коллективные возбуждения, фононы и т. п., а также электромагнитные поля, взаимодействующие с частицами системы. Но основной структурный элемент статистической системы — это молекулы, т. е. квантово-механические системы из ядер, включающих значительное число элементарных частиц — нуклонов, окруженных достаточно обширными электронными оболочками. Т. е. «частицы», составляющие статистическую систему, имеют размер, измеряемый в масштабе боровского радиуса (т. е. в ангстремах), учет которого существенен, так как в реальных физических системах он соизмерим со средним расстоянием между частицами. И эти большие и сложные системы не исчезают и не рождаются, а существуют постоянно, изменяя лишь свои состояния.

Основной результат, связанный с использованием представления вторичного квантования в квантовой статистике (и основной успех этой акции) состоит в том, что оно снимает проблему учета первоначальной квантовой природы системы одинаковых частиц (т. е. проблему симметризации или антисимметризации функций состояния, с помощью которых рассчитываются средние значения), разрешив ее как бы заранее и в универсальном виде, отразив эту квантовую природу в форме достаточно простых перестановочных соотношений для элементарных операторов, с помощью которых конструируются все необходимые для рассмотрения статистических проблем величины.

Для того чтобы использование представления вторичного квантования было бы эффективным в реально осуществляемых исследованиях (а не только в общетеоретическом плане), приходится идти на вынужденную меру, выбирая соответствующие конструкции из плоских волн в качестве N -частичных базисных функций (т. е. использовать в качестве базиса собственные функции соответствующих идеальных систем), что приводит к построению достаточно удобного «импульсного» (в некоторых случаях и «координатного») представления вторичного квантования. Такой выбор производится не вследствие подражания квантовой теории поля, в которой

квантуются свободные поля, а затем уже вспоминается об их возможном взаимодействии друг с другом. Просто в нерелятивистской теории нет иных имеющих не символическое, а известное и простое аналитическое выражение функций, кроме упомянутых выше конструкций.

За эту чисто техническую уступку приходится расплачиваться сразу же возникающими трудностями. Реалистические модели потенциала взаимодействия частиц друг с другом $\Phi(R)$, учитывающие конечный размер частиц $d = 2r_0$, не имеют фурье-образа $\nu(q)$, определяющего в представлении вторичного квантования структуру оператора H_1 ,

$$\langle p+q, p'-q | \Phi(R) | p', p \rangle = \nu(q) = \int \Phi(R) e^{i\mathbf{qR}} d\mathbf{R} = \infty.$$

Плоские волны покрывают все координатное N -частичное пространство, для них нет запрещенных участков, в то время как для системы N частиц, имеющих конечный диаметр $2r_0$, это пространство «продырявлено» сферами, внутри которых описывающие их состояние волновые функции обязаны равняться нулю. Плосковолновой базис этого, конечно, обеспечить не может.

В статистической физике классических систем, которыми являются практически все реальные газы и жидкости, для исследования которых квантово-полевой техники не требуется, эта трудность, связанная с учетом собственного объема молекул, преодолевается достаточно просто, например с помощью майеровской техники (см. т. 2, гл. 3, § 1, а также т. 2, с. 390–402). Но в природе существуют доступные для экспериментальных исследований квантовые жидкости из молекул конечных размеров, в частности жидкий He^4 (вырожденная бозе-жидкость) и жидкий He^3 (ферми-жидкость), и вопрос о преодолении указанной динамической трудности в квантовой статистике, существенно использующей аппарат вторичного квантования, становится открытым.

В задачах квантовой механики учет бесконечно сильного отталкивания частиц друг от друга принципиальных трудностей не вызывает. Напомним вкратце, как это происходит при решении задачи о рассеянии двух таких частиц друг на друге. Вследствие невозможности в этой ситуации использовать плоские волны $\varphi_p(\mathbf{r})$, в основу рассмотрения полагаются функции $\psi_p^{(+)}(\mathbf{r})$ и $\psi_p^{(-)}(\mathbf{r})$, соответствующие расходящимся от отталкивающего силового центра и сходящимся к нему волнам, и t -оператор рассеяния, обладающий свойством

$$H_1 \psi_p^{(+)} = t \varphi_p,$$

где в задаче двух тел $H_1 = \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, и удовлетворяющий преобразованному уравнению Шредингера, учитывающему характерное для задач рассеяния граничное условие на бесконечности,

$$t = H_1 + H_1 \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} t = H_1 + H_1 \frac{1}{E - H + i\epsilon} H_1,$$

где $H = H_0 + H_1$. Свойство оператора t «превращать» неизвестные, но объективно существующие волновые функции $\psi_p^{(+)}(\mathbf{r})$, с помощью которых надо было бы рассчитывать матричные элементы потенциала взаимодействия $\Phi(R)$ и которые внутри сферы бесконечно сильного отталкивания равны нулю, в плоские волны позволяет заменить их на согласованные по импульсам матричные элементы t -оператора рассеяния, рассчитанные уже с помощью соответствующих плоских волн. Если в дополнение к этому использовать известное решение уравнения для t -оператора в приближении длины рассеяния (т. е. в пределе малых значений передаваемого

импульса q), где длина рассеяния a определяется как предельное значение дифференциального сечения

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{q \rightarrow 0} = a^2.$$

Таким образом, схема всего подхода в целом будет выглядеть следующим образом:

$$\nu(q) = \langle \mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{q} | \Phi(R) | \mathbf{p}', \mathbf{p} \rangle \mapsto \langle \mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{q} | t | \mathbf{p}', \mathbf{p} \rangle^{(0)} \cong \frac{2\pi a \hbar^2}{m}.$$

Казалось бы, проблема преодолена, и только что сформулированную итоговую процедуру можно распространить на систему многих частиц. Однако, при этом мы сразу встречаемся с непреодолимыми возражениями, полностью закрывающими эту заманчивую возможность.

Во-первых, аппроксимация взаимодействий частиц в квантовых жидкостях последовательностью парных рассеяний свободных частиц друг на друге может быть физически оправданной лишь в случае $2r_0 \ll \sqrt[3]{V/N}$. На деле же для жидкого гелия $2r_0 \cong 1,7 \text{ \AA}$, а среднее расстояние между частицами $\sqrt[3]{V/N} \cong 3,6 \text{ \AA}$, т.е. этот критерий применимости t -матричного приближения в теории многих частиц на практике не реализуется.

Во-вторых, замена даже в принципе интегрируемой функции $\nu(q)$ на константу не только нарушает всю сбалансированную схему, связанную с использованием фурье-представлений, но и приводит к расходимости, начиная со второго порядка теории возмущений, энергии основного состояния системы (см. более подробно гл. 4, § 2), что абсолютно неприемлемо, так как с подобным «дефектом» статистические системы просто не могут существовать. Это означает, что попытки обойти трудности учета собственного объема молекул квантовых жидкостей с помощью подобной аппроксимации оказываются не только безуспешными, но и просто ненаучными (несмотря на то, что именно она поддерживалась и использовалась в престижных руководствах по статистической физике).

На обсуждении кинематических трудностей, характерных для вырожденных неидеальных бозе-систем, мы остановимся в дальнейшем в специальной главе, а сейчас обратимся к динамическим трудностям, связанным с учетом взаимодействия частиц электронного газа в металлах.

Потенциал взаимодействия электронов в нерелятивистской теории — это закон Кулона $\Phi(R) = e^2/R$ (и с большой степенью точности $r_0 = 0$). Напомним, что фурье-образ кулоновского потенциала в определенном смысле условен,

$$\nu(q) = \int \frac{e^2}{R} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} d\mathbf{R} = 2\pi e^2 \int_0^\infty \frac{1}{R} R^2 dR \int_{-1}^1 e^{i\mathbf{q}R\mathbf{x}} dx = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \int_0^\infty \sin y dy = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2}.$$

Условность последнего равенства, в котором несобственный интеграл с синусом заменяется на единицу, связана с тем, что в природе существуют два вида электрических зарядов, и по этой причине кулоновское взаимодействие в принципе экранируемо (речь идет в данном случае не о дебаевской экранировке, а об общем принципе), поэтому вполне допустимо физически оправданное «доопределение» кулоновского взаимодействия, форма которого уже допускает математически корректное введение его фурье-образа,

$$\frac{e^2}{R} \mapsto \left. \frac{e^2}{R} e^{-\kappa R} \right|_{\kappa \rightarrow 0} \xleftarrow{F} \left. \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2 + \hbar^2 \kappa^2} \right|_{\kappa \rightarrow 0} \longrightarrow \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2}.$$

Обратимся теперь к форме оператора взаимодействия электронов друг с другом H_1 , записанного в представлении вторичного квантования. Выделяя в нем сингулярное слагаемое с $q = 0$, получаем выражение

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{1}{2V} \nu(0) \sum_{pp'} a_p^+ a_{p'}^+ a_{p'} a_p + \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p = \\ &= \frac{N^2}{2V} \nu(0) + \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p, \end{aligned}$$

которое имеет смысл только в том случае, когда величина $\nu(0)$ понимается в допределенном смысле, т. е. $\nu(0) = 4\pi e^2 \hbar^2 / \kappa^2 \neq \infty$.

Учтем теперь, что одни электроны не образуют статистической системы, система в целом должна быть электрически нейтральной, и гамильтониан всей системы должен включать учет взаимодействия электронов с положительными ионами, а также ионов друг с другом.

Чтобы не рассматривать двухкомпонентную систему и сосредоточить все внимание только на эффектах, связанных исключительно с вырожденным газом электронов, фон положительно заряженной решетки аппроксимируют так называемой моделью желе — равномерно размазанным положительным зарядом с плотностью $\rho_e = eN/V$, равной по модулю средней плотности заряда электронного газа. Тогда энергия электростатического взаимодействия размазанной ионной среды самой с собой будет равна

$$H_{ii} = \frac{1}{2} \iint_{(V)} \frac{\frac{N}{V} e \, d\mathbf{r}_1 \cdot \frac{N}{V} e \, d\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int \frac{e^2}{r} \, d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \nu(0)$$

(т. е. в точности первому слагаемому в H_1), а энергия взаимодействия электронов с положительно заряженным фоном ионов (притяжение)

$$H_{ei} = -N \int \frac{\frac{N}{V} e \, d\mathbf{r}}{r} = -\frac{n^2}{V} \nu(0)$$

оказывается ровно в два раза большей по модулю и другого знака, что в итоге определяет рабочий вид гамильтониана электронного газа

$$H_{\text{эл}} = \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p.$$

Устранив эту первоначальную, так сказать постановочную, динамическую трудность, мы тем не менее не оградим себя от проявления в дальнейших исследованиях особенностей дальнедействующего кулоновского потенциала, сказывающихся в поведении его фурье-образа при малых импульсах, $\nu(q) \sim 1/q^2$. Особенность поведения функции $\nu(q)$ при $q \rightarrow 0$, как нетрудно догадаться, приводит к расходящимся выражениям при некоторых системах спариваний (см. рис. 3) уже во втором порядке термодинамической теории возмущений, именно, в конструкциях с совпадающими аргументами q , содержащих интегралы типа

$$\int \nu^2(q) \, dq \sim \int \frac{1}{q^4} \, dq \sim \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} \rightarrow \infty,$$

что свидетельствует отнюдь не о крушении теории, а лишь о том, что термодинамические характеристики неидеального электронного газа неаналитически зависят от константы взаимодействия $g = e^2$ (в нерелятивистской теории (см. т. 2, гл. 3, § 1, п. д)) мы получили, что учет неидеальности электронной плазмы начинается с членов, пропорциональных $e^3 = g^{3/2}$) и что перед поправкой второго порядка, пропорциональной $g^2 = e^4$, должен фигурировать вклад с более сильной зависимостью от g . Мы обсудим эту проблему в главе, посвященной конкретному исследованию электронного газа, ограничиваясь здесь только установлением исходного для такого исследования гамильтониана системы.

§ 4. Статистические операторы и s -частичные корреляционные функции

В общем формализме квантовой статистики s -частичные статистические операторы, где $s = 1, 2, \dots$ (т. е. небольшое число), играют роль, по своему характеру аналогичную роли одно-, двух- и т. д. частичных функций распределения в классической статистической механике. Практически ни одно исследование квантовомеханической системы не обходится без использования в той или иной форме статистических операторов нескольких частиц. В последнем параграфе вводной главы мы рассмотрим эти операторы и остановимся на некоторых их общих свойствах, ограничиваясь для простоты и в иллюстративном плане рассмотрением модели нерелятивистской системы N частиц с парным их взаимодействием друг с другом.

а) Статистические операторы R_s

Прежде всего, заметим, что статистический оператор N -частичной системы $\rho(1, \dots, N)$, введенный нами в § 2, в принципе решает, конечно, проблему определения средних от динамических величин, однако, как мы уже отмечали, интересующие нас величины — это величины одно-, двух- и т. д. частичного типа, операторы которых представлены в виде сумм, «перебирающих» частицы по одной, парами и т. д. Таким образом, информация о системе, содержащаяся в величине $\rho(1, 2, \dots, N)$, в которой фиксируются аргументы сразу всех N частиц системы, оказывается избыточной (не говоря уже о том, что с технической точки зрения рассмотрение функций $\langle x'_1, \dots, x'_N | \rho | x_1, \dots, x_N \rangle$ от $2N$ сложных аргументов представляется явно нецелесообразным). Введем в связи с этим s -частичные операторы, представляющие собой свертки статистического оператора $\rho(1, \dots, N)$ по переменным всех частиц, кроме каких-либо s из них (учитывая симметрию оператора $\rho(1, \dots, N)$ относительно любых перестановок индексов частиц, проще всего оставить нетронутыми в операторе ρ первые s переменных). Таким образом, получаем для одночастичного, двухчастичного, ..., s -частичного статистических операторов

$$R_1(1) = \text{Sp}_{(2, \dots, N)} \rho(1, 2, \dots, N);$$

$$R_2(1, 2) = \text{Sp}_{(3, \dots, N)} \rho(1, 2, 3, \dots, N);$$

$$R_s(1, \dots, s) = \text{Sp}_{(s+1, \dots, N)} \rho(1, \dots, s, s+1, \dots, N).$$

Вводя традиционную классификацию операторов динамических величин аддитивного (или одночастичного), бинарного (двухчастичного) и s -частичного типа

$$\mathfrak{A}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i \leq N} A(i);$$

$$\mathfrak{B}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 \leq N} B(i_1, i_2);$$

$$\mathfrak{S}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq N} S(i_1, \dots, i_s),$$

получаем выражения для их средних значений, исчисляемых с помощью операторов R_1 , R_2 и R_s ,

$$\langle \mathfrak{A} \rangle = \text{Sp} \sum_{1 \leq i \leq N} A(i) \rho(1, \dots, i \dots N) = N \text{Sp} A(1) R_1(1), \quad (1)$$

$$\langle \mathfrak{B} \rangle = \text{Sp} \sum_{1 \leq i_1 < i_2 \leq N} B(i_1, i_2) \rho(1, \dots, i_1 \dots, i_2 \dots N) = \frac{N(N-1)}{2} \text{Sp} B(1, 2) R_2(1, 2), \quad (1,2)$$

$$\langle \mathfrak{S} \rangle = \text{Sp} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq N} S(i_1, \dots, i_s) \rho(1, \dots, N) = \frac{N!}{(N-s)! s!} \text{Sp} S(1, \dots, s) R_s(1, \dots, s).$$

Записывая последнюю формулу в конкретном p -представлении ($\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$):

$$\langle \mathfrak{S} \rangle = \frac{N!}{(N-s)! s!} \times \sum_{\substack{p_1, \dots, p_s \\ p'_1, \dots, p'_s}} \langle p_1, \dots, p_s | S(1, \dots, s) | p'_1, \dots, p'_s \rangle \langle p'_1, \dots, p'_s | R_s(1, \dots, s) | p_1, \dots, p_s \rangle$$

и вспоминая (см. § 3), что оператор \mathfrak{S} в импульсном же варианте представления вторичного квантования записывается в виде аналогичной суммы

$$\mathfrak{S} = \frac{1}{s!} \sum_{\substack{p_1, \dots, p_s \\ p'_1, \dots, p'_s}} \langle p_1, \dots, p_s | S(1, \dots, s) | p'_1, \dots, p'_s \rangle a_{p_1}^+ \dots a_{p_s}^+ a_{p'_s} \dots a_{p'_1},$$

получаем, сравнивая два представления для средних $\langle \mathfrak{S} \rangle$, что

$$\sum_{\{p, p'\}} \langle p_1, \dots, p_s | S(1, \dots, s) | p'_1, \dots, p'_s \rangle \times \left\{ \frac{N!}{(N-s)!} \langle p'_1, \dots, p'_s | R_s(1, \dots, s) | p_1, \dots, p_s \rangle - \langle a_{p_1}^+ \dots a_{p_s}^+ a_{p'_s} \dots a_{p'_1} \rangle \right\} = 0.$$

Так как это соотношение имеет место при любом выборе операторов $S_1(1, \dots, s)$ то комбинация величин, стоящая в фигурных скобках, равна нулю, и мы приходим к выражению операторов R_s в p -представлении через средние значения от соответствующих произведений операторов рождения и уничтожения

$$\langle p'_1, \dots, p'_s | R_s(1, \dots, s) | p_1, \dots, p_s \rangle = \frac{(N-s)!}{N!} \langle a_{p_1}^+ \dots a_{p_s}^+ a_{p'_s} \dots a_{p'_1} \rangle,$$

в котором специфика рассматриваемой конкретной системы, определяемая ее гамильтонианом и т. д. и как бы спрятанная за угловыми скобками, учитывается в процессе взятия среднего, в частности,

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Sp} \{ \dots e^{-H/\theta} \}}{\text{Sp} e^{-H/\theta}}.$$

б) Корреляционные операторы F_s

В предельном статистическом случае $N \rightarrow \infty$, $v = V/N = \text{const}$ в силу основной асимптотики факториалов, определяемой формулой Стирлинга, полученный выше коэффициент при среднем от произведения операторов a^+ и a имеет достаточно высокий порядок по $1/N$,

$$\frac{(N-s)!}{N!} \sim \frac{(N-s)^{N-s}}{N^N} \sim \left(\frac{1}{N} \right)^s,$$

а так как средние величины $\langle a_{p_1} \dots a_{p_s} \rangle$ явно величину N не включают, то статистический порядок операторов R_s оказывается несоизмеримым с фигурирующими в статистической теории величинами,

$$R_s \sim \frac{1}{N^s} \sim \frac{1}{V^s}.$$

В связи с этим переопределим s -частичные статистические операторы так, чтобы они в предельном статистическом случае имели бы нулевую асимптотику по числу частиц N ,

$$F_s(1, \dots, s) = V^s R_s(1, \dots, s) = V^s \text{Sp}_{(s+1, \dots, N)} \rho(1, \dots, s, s+1, \dots, N)$$

(это определение аналогично формулам, выражающим s -частичные корреляционные функции как равновесной, так и неравновесной классической системы через N -частичную функцию распределения, см. т. 2, гл. 3, § 1 и т. 3, гл. 5, § 4). Тогда после предельного перехода $N \rightarrow \infty$, $v = \text{const}$ мы получим для средних величин следующую формулу:

$$\langle \mathcal{G} \rangle = \frac{1}{s!} \frac{1}{v^s} \text{Sp}_{(1, \dots, s)} S(1, \dots, s) F_s(1, \dots, s).$$

В импульсном p -представлении в соответствии с полученным для оператора R_s результатом будем иметь в послепредельном случае

$$\langle p'_1, \dots, p'_s | F_s(1, \dots, s) | p_1, \dots, p_s \rangle = v^s \langle a_{p'_1}^+ \dots a_{p'_s}^+ a_{p_s} \dots a_{p_1} \rangle,$$

а координатное x -представление ($x_i = r_i, \sigma_i$) корреляционных операторов F_s выразится соответствующим образом через средние от произведений операторных волновых функций $\Psi^+(x)$ и $\Psi(x')$,

$$\langle x'_1, \dots, x'_s | F_s(1, \dots, s) | x_1, \dots, x_s \rangle = v^s \langle \Psi^+(x_1) \dots \Psi^+(x_s) \Psi(x'_s) \dots \Psi(x'_1) \rangle.$$

в) Уравнение движения для оператора F_s

Рассмотрим систему с парным взаимодействием частиц друг с другом

$$H = \sum_{1 \leq i \leq N} H(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(i, j).$$

Выделяя группу из первых s частиц,

$$H_s = \sum_{1 \leq i \leq s} H(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi(i, j),$$

представим оператор Гамильтона в виде четырех слагаемых,

$$H = H_s + \sum_{s+1 \leq i \leq N} H(i) + \sum_{s+1 \leq i < j \leq N} \Phi(i, j) + \sum_{1 \leq i \leq s} \sum_{s+1 \leq j \leq N} \Phi(i, j),$$

и учтем, что для $i \geq s+1$

$$\text{Sp}_{(s+1, \dots, N)} [H_i, \rho(1, \dots, s, s+1, \dots, i, \dots, N)]_- = 0$$

и что в случае $s+1 \leq i < j \leq N$

$$\text{Sp}_{(s+1, \dots, N)} [\Phi(i, j), \rho(1, \dots, s, s+1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)]_- = 0.$$

Тогда, учитывая симметрию оператора $\rho(1, \dots, N)$ относительно перестановок индексов $1, \dots, N$, получим из общего квантового уравнения Лиувилля—фон Неймана

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]_-,$$

подействовав на него почленно операцией $V^s \text{Sp}_{(s+1, \dots, N)} \dots$, что оператор H_s выносится

за знак этой операции, второе и третье слагаемые в гамильтониане H , не содержащие индексов, меньших $s+1$, дадут нулевые вклады, а последнее преобразуется к виду

$$\begin{aligned} V^s \text{Sp}_{(s+1, \dots, N)} \sum_{1 \leq i \leq s} \sum_{s+1 \leq j \leq N} [\Phi(i, j), \rho(1, \dots, s, s+1, \dots, N)]_- = \\ = \frac{N-s}{V} \sum_{1 \leq i \leq s} \text{Sp}_{(s+1)} [\Phi(i, s+1), V^{s+1} \text{Sp}_{(s+2, \dots, N)} \rho(1, \dots, s+1, s+2, \dots, N)]_- , \end{aligned}$$

что приводит к уравнению для s -частичного оператора F_s , которое после статистического предельного перехода приобретает вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F_s(1, \dots, s)}{\partial t} = [H_s, F_s]_- + \frac{1}{v} \sum_{1 \leq i \leq s} \text{Sp}_{(s+1)} [\Phi(i, s+1), F_{s+1}(1, \dots, s, s+1)]_- .$$

Это уравнение как в смысле своего содержания, так и с формальной точки зрения эквивалентно классическому уравнению Боголюбова (1946) для s -частичной функции распределения (см. т. 3, гл. 5, § 4) и является представителем цепочки Боголюбова для операторов F_1, F_2 и т. д. в общем квантовом случае. Эти уравнения должны быть дополнены условиями нормировки,

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \text{Sp} \frac{1}{V^s} F_s = 1; \quad \lim_{V \rightarrow \infty} \text{Sp}_{(s+1)} \frac{1}{V} F_{s+1} = F_s; \quad \dots,$$

условиями типа начальных или условиями стационарности и, наконец, условиями ослабления корреляций — своеобразными граничными условиями, одно из которых, например, для двухчастичного оператора F_2 , записанного в координатном представлении, имеет вид

$$F_2(1, 2) \rightarrow F_1(1) \cdot F_1(2) \quad \text{в пределе} \quad |r_1 - r_2| \rightarrow \infty.$$

Процедура расцепления этой системы уравнений для F_1, F_2 и т. д., приводящая к замкнутой системе уравнений (в простейшем случае — к одному замкнутому уравнению, например, для F_1), не является универсальной и, как и в классической теории, связана с анализом физических особенностей конкретной статистической системы, характера взаимодействия ее частиц друг с другом, термодинамических условий, в которые помещена система, и т. д.

г) Простейшие случаи

Рассмотрим систему с парным центральным взаимодействием частиц

$$H = \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_q \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p,$$

где $E_p = p^2/(2m)$, в случае статистического равновесия, когда $\rho = e^{-H/\theta}/Z$.

В простейшем случае $s = 1$ имеем для одночастичного оператора F_1 в импульсном p -представлении

$$\langle p' | F_1 | p \rangle = v \frac{1}{Z} \text{Sp} \{ a_p^+ a_{p'} e^{-H/\theta} \} = \frac{v}{Z} \sum_{nn'} \langle n | a_p^+ a_{p'} | n' \rangle \langle n' | e^{-H/\theta} | n \rangle.$$

Так как оператор H сохраняет полный импульс системы \mathbf{P} , $[H, \mathbf{P}]_- = 0$ (его сохраняет каждое слагаемое в гамильтониане H), то отличные от нуля матричные элементы экспоненциального оператора $\langle n' | e^{-H/\theta} | n \rangle$ будут соответствовать случаю, когда импульсы системы в состояниях $|n'\rangle$ и $|n\rangle$ совпадают, $\mathbf{P}' = \mathbf{P}$. С другой стороны, оператор $a_p^+ a_{p'}$ сохраняет импульс только в случае $p' = p$. Таким образом, получаем

$$\langle p' | F_1 | p \rangle = \Delta(p - p') v n_p,$$

где n_p — средние числа заполнения для рассматриваемой системы,

$$n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle.$$

Вводя нормированную на единицу функцию распределения частиц по импульсам $w(p)$, будем иметь

$$w(p) = \frac{1}{N} n_p = \frac{1}{V} \langle p | F_1 | p \rangle, \quad \int w(p) dp = 1,$$

т. е. диагональные матричные элементы одночастичного оператора F_1 в импульсном представлении (недиагональных элементов в данном случае нет вообще) определяют распределение $w(p)$, характеризующее в общем случае квантовую неидеальную систему. Заметим, что если система находится во внешнем поле и в гамильтониане присутствует оператор U , не сохраняющий полный импульс частиц системы, то оператор F_1 в импульсном представлении уже не будет диагональным.

Если мы выразим теперь с помощью оператора F_1 среднюю плотность числа частиц в системе, то, считая функцию $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)$ диагональной в координатном представлении, получим

$$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{v} \text{Sp} \{ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) F_1(1) \} = \frac{1}{v} \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \langle \mathbf{r}_1 | F_1 | \mathbf{r} \rangle d\mathbf{r}_1,$$

и мы приходим к выводу, что нормированное на единицу распределение числа частиц в координатном пространстве $w(\mathbf{r})$ непосредственно связано с диагональным

координатным представлением этого оператора

$$w(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \langle \mathbf{r} | F_1 | \mathbf{r} \rangle, \quad \int w(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1.$$

Рассмотрим теперь случай пространственно-однородной равновесной системы, когда одновременный сдвиг всех пространственных аргументов не изменяет рассматриваемых в теории величин, в частности,

$$\langle \mathbf{r}'_1 + \mathbf{r}, \dots, \mathbf{r}'_s + \mathbf{r} | F_s | \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}, \dots, \mathbf{r}_s + \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s | F_s | \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s \rangle$$

для любого перенесения на величину \mathbf{r} начала отсчета всех координат. По отношению к оператору F_1 , взятому в координатном представлении, будем тогда иметь, учитывая изотропность системы, что

$$\langle \mathbf{r}' | F_1 | \mathbf{r} \rangle = \langle 0 | F_1 | \mathbf{r} - \mathbf{r}' \rangle = F_1(R),$$

где $R = |\mathbf{R}| = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, а диагональные элементы этого оператора равны единице,

$$\langle \mathbf{r} | F_1 | \mathbf{r} \rangle = F_1(0) = 1,$$

в соответствии с пространственно-однородным распределением плотности числа частиц по всей системе, $w(\mathbf{r}) = 1/V$.

С прикладной точки зрения при расчетах многих характеристик системы большое значение играет диагональная в координатном представлении часть двухчастичного оператора F_2 , называемая парной корреляционной функцией, которая в пространственно-однородном изотропном случае зависит только от одного аргумента — модуля $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = R$,

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \langle \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0 | F_2 | \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, 0 \rangle = F_2(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = F_2(R).$$

С помощью этой функции, например, среднее от гамильтониана взаимодействия H_1 , т. е. вклад во внутреннюю энергию системы, определяемый учетом взаимодействия частиц системы друг с другом, можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle H_1 \rangle &= \frac{N(N-1)}{2} \text{Sp} \left\{ \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \frac{1}{V^2} F_2(1, 2) \right\} = \\ &= \frac{1}{2v^2} \int \int_{(V)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) F_2(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{N}{2v} \int d\mathbf{R} \Phi(R) F_2(R). \end{aligned}$$

По форме это выражение в точности соответствует классическому результату, когда в качестве $F_2(R)$ фигурирует классическая парная корреляционная функция (см. т. 2, гл. 3, § 1, п. б))

$$F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V^2 \frac{1}{Q} \int e^{-H_1/\theta} d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N,$$

где Q — конфигурационный интеграл. Совершенно так же совпадают по форме с классическими все выраженные с помощью диагональной части двухчастичного оператора $F_2(R)$ термодинамические характеристики системы, дисперсия флуктуаций плотности ее частиц и т. д. (Мы вернемся к рассмотрению и выводу формул, выражающих физические характеристики системы с помощью корреляционных операторов и соответствующих им функций Грина, в специальной главе.)

д) Связь простейших корреляционных функций с вариациями свободной энергии системы

Гамильтониан рассматриваемой нами системы помимо зависимости от динамических переменных (p_i, r_i) зависит еще от целого ряда параметров, характеризующих энергию частиц E_p , интенсивность взаимодействия их с внешним полем U , друг с другом $\Phi(R)$ и т. д. Представим вариацию гамильтониана H по отношению к изменениям именно этих параметров в виде

$$\delta H = \sum_{1 \leq i \leq N} (\delta E_{p_i} + \delta U(r_i)) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \delta \Phi(|r_i - r_j|).$$

Тогда соответствующее вариации δH изменение свободной энергии системы \mathcal{F} выразится как

$$\delta \mathcal{F} = \delta(-\theta \ln \text{Sp } e^{-H/\theta}) = \frac{\text{Sp } \{\delta H e^{-H/\theta}\}}{\text{Sp } e^{-H/\theta}} = \langle \delta H \rangle.$$

Заметим, что при варьировании выражения для $\delta \mathcal{F}$ мы как бы оставили неизменными те функции, с помощью которых рассчитывается Sp . Это обстоятельство, являющееся следствием известной теоремы о вариации собственных значений оператора Гамильтона, $\delta E_n = \langle n | \delta H | n \rangle$, в данном случае почти очевидно: так как результат операции Sp не зависит от выбора представления, т. е. той системы функций, с помощью которых рассчитывается шпур, то эту систему можно выбирать так, чтобы определяющие ее функции вообще не зависели бы от варьируемых параметров, как, например, собственные функции идеальной системы N тел. Записывая последний результат с помощью корреляционных функций F_1 и F_2 в соответствующих представлениях, получим

$$\delta \mathcal{F} = \frac{1}{v} \int \delta U(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | F_1 | \mathbf{r} \rangle d\mathbf{r} + \frac{1}{v} \sum_p \delta E_p \langle \mathbf{p} | F_1 | \mathbf{p} \rangle + \frac{V}{2v^2} \int \delta \Phi(R) F_2(R) dR,$$

откуда непосредственно следуют формулы

$$\langle \mathbf{r} | F_1 | \mathbf{r} \rangle = V w(\mathbf{r}) = v \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta U(\mathbf{r})},$$

$$\langle \mathbf{p} | F_1 | \mathbf{p} \rangle = V w(\mathbf{p}) = v n_p = v \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta E_p},$$

$$F_2(R) = \frac{2v^2}{V} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \Phi(R)}.$$

Таким образом, имея в распоряжении полученное в каком-то определенном приближении выражение для свободной энергии \mathcal{F} (т. е. для макроскопической характеристики системы), в котором еще не произведено интеграций по \mathbf{p} и \mathbf{r} и сохранена явная зависимость от E_p , $U(\mathbf{r})$ и $\Phi(R)$, мы можем, беря вариационные производные, получить обобщенное барометрическое распределение $w(\mathbf{r})$, средние числа заполнения n_p и соответствующее распределение по импульсам $w(\mathbf{p})$, а также парную корреляционную функцию $F_2(R)$, т. е. ряд микроскопических характеристик системы, соответствующих в смысле приближения варьируемой свободной энергии \mathcal{F} .

Остановимся в конце этого пункта на одном важном следствии последней из полученных формул. Пусть вариация $\delta \Phi(1, 2)$ обусловлена только изменением параметра, характеризующего интенсивность взаимодействия частиц друг с другом.

Чтобы выразить это явным образом, заменим чисто формально $H_1 \rightarrow gH_1$, имея в виду, что интересующий нас случай соответствует значению $g = 1$. Пусть $\mathcal{F}(g)$ — свободная энергия системы, определяемой гамильтонианом с «недовключенным» взаимодействием частиц друг с другом. Тогда

$$\frac{\partial \mathcal{F}(g)}{\partial g} = \frac{N}{2v^2} \int \Phi(R) F_2^{(g)}(R) d\mathbf{R} = \langle H_1 \rangle^{(g)},$$

где среднее $\langle \dots \rangle^{(g)}$ подсчитывается с помощью равновесного статистического оператора, определяемого гамильтонианом $H_0 + gH_1$. Это формальное уравнение можно проинтегрировать по g , используя в качестве начального условия известную величину свободной энергии идеальной системы

$$\mathcal{F}(g)|_{g=0} = \mathcal{F}_0.$$

Тогда для разности свободной энергии рассматриваемой системы ($g = 1$) и свободной энергии идеального газа получим

$$\Delta \mathcal{F} = \mathcal{F} - \mathcal{F}_0 = \int_0^1 \langle H_1 \rangle^{(g)} dg = \int_0^1 \left(\frac{\text{Sp} \{ g H_1 e^{-(H_0 + g H_1)/\theta} \}}{\text{Sp} e^{-(H_0 + g H_1)/\theta}} \right) \frac{dg}{g} = \int_0^1 \langle g H_1 \rangle^{(g)} \frac{dg}{g},$$

где

$$\langle g H_1 \rangle^{(g)} = \frac{N}{2v^2} \int_0^\infty g \Phi(R) F_2^{(g)}(R) 4\pi R^2 dR.$$

Эта формула для $\Delta \mathcal{F}$ определяет не только свободную энергию системы, но и все макроскопические характеристики системы с помощью только одной корреляционной функции $F_2^{(g)}(R)$, но зато подсчитанной для всех нефизических значений параметра g от нуля до единицы. Мы остановимся на этой формуле более подробно в главе, посвященной приложениям.

е) Парная корреляционная функция идеальных газов

Данный пункт является естественным дополнением к теории идеальных квантовых газов, изложенной в пособии т. 2, гл. 2, § 2. В связи с тем, что в указанном пособии не возникало необходимости в использовании представления вторичного квантования, вопрос о кинематическом влиянии бозевости или фермиевности системы на парную корреляционную функцию идеальных газов остался не выясненным. Рассмотрим этот вопрос, используя изложенные выше общие положения и развитую нами в § 3 методику.

Исходя из импульсного представления двухчастичного статистического оператора

$$\langle p'_1, p'_2 | F_2 | p_1, p_2 \rangle = v^2 \langle a_{p'_1}^+ a_{p'_2}^+ a_{p_2} a_{p_1} \rangle$$

и учитывая, что усреднение операторов в правой части в рассматриваемом случае производится с помощью статистического оператора ρ для идеального газа, мы можем воспользоваться для расчета этого среднего от произведения четырех полевых операторов теоремой о спариваниях (см. § 3). Тогда получим, обозначая стандартным образом средние числа заполнения для идеальных бозе и ферми газов $\langle a_p^+ a_p \rangle = n_p$,

$$\langle p'_1, p'_2 | F_2 | p_1, p_2 \rangle = v^2 n_{p_1} n_{p_2} (\Delta(p_1 - p'_1) \Delta(p_2 - p'_2) \pm \Delta(p_1 - p'_2) \Delta(p_2 - p'_1)).$$

Если частицы 1 и 2 имеют несовпадающие спиновые состояния, например, в бозе-случае $s_1 = 0$, $s_2 = 1$, а в ферми-случае $s_1 = -s_2 = 1/2$, то второе слагаемое, содержащее в формулах $\Delta(p_1 - p'_1)$ и $\Delta(p_2 - p'_2)$ помимо импульсных также и спиновые Δ -функции $\Delta(s_1 - s_2)$ и $\Delta(s_2 - s_1)$, будет равняться нулю, и мы получим, переходя к координатному представлению, что в этом случае

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle &= F_2(R) = \frac{v^2}{V^2} \sum_{p_1, p_2, p'_1, p'_2} e^{i\hbar^{-1}(p_1 r_1 + p_2 r_2 - p'_1 r_1 - p'_2 r_2)} n_{p_1} n_{p_2} \Delta(p_1 - p'_1) \Delta(p_2 - p'_2) = \\ &= \frac{v^2}{V^2} \sum_{p_1, p_2} n_{p_1} n_{p_2} = \frac{v^2 N^2}{V^2} = 1, \end{aligned}$$

т. е. никакой корреляции в идеальных газах между частицами с разными значениями спина нет (напомним, что для классической идеальной системы в случае $H_1 = 0$ мы имели тот же результат $F_2(R) = 1$).

Рассмотрим теперь случай, когда частицы имеют одинаковые спиновые состояния, например, для бозе-частиц $s_1 = s_2 = 0$, для ферми-частиц — аналогично $s_1 = s_2 = 1/2$ (или $-1/2$). Тогда вторая система спариваний дает конечный результат, который в координатном представлении образует специфически квантовый кинематический вклад в корреляционную функцию $F_2(R)$,

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \frac{v^2}{V^2} \sum_{p_1, p_2} n_{p_1} n_{p_2} (1 \pm e^{i\hbar^{-1}(p_1 - p_2)(r_1 - r_2)}).$$

Обозначая $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{R}$, получаем, что этот вклад целиком определяется модулем фурье-образа средних чисел заполнения в квадрате,

$$F_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = F_2(R) = 1 \pm v^2 \left| \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{i\hbar^{-1}\mathbf{p}\mathbf{R}} \right|^2.$$

Чтобы довести расчет функции $F_2(R)$ до конца, рассмотрим сначала простой случай невырожденной системы, т. е. случай высоких температур по сравнению с температурой вырождения,

$$\theta \gg \theta_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}.$$

Тогда в нулевом приближении

$$n_{\mathbf{p}} = e^{\mu/\theta} \cdot e^{-p^2/(2m\theta)} + \dots$$

Обозначая $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$, имеем

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{p_x^2}{2m\theta} + \frac{i}{\hbar} p_x X \right\} dp_x = \frac{\sqrt{2\pi m\theta}}{2\pi\hbar} e^{-(m\theta/2\hbar^2)X^2}$$

и поэтому

$$F_2(R) = 1 \pm \left(v \frac{(2\pi m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\mu/\theta} \cdot e^{-(m\theta/(2\hbar^2))R^2} \right)^2,$$

где $R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2$. Учитывая, что вследствие условия $\sum_p n_p = N$

$$v \frac{(2\pi m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\mu/\theta} = 1,$$

получаем окончательно для парной корреляционной функции достаточно простое выражение (рис. 5)

$$F_2(R) = 1 \pm e^{-(m\theta/\hbar^2)R^2}.$$

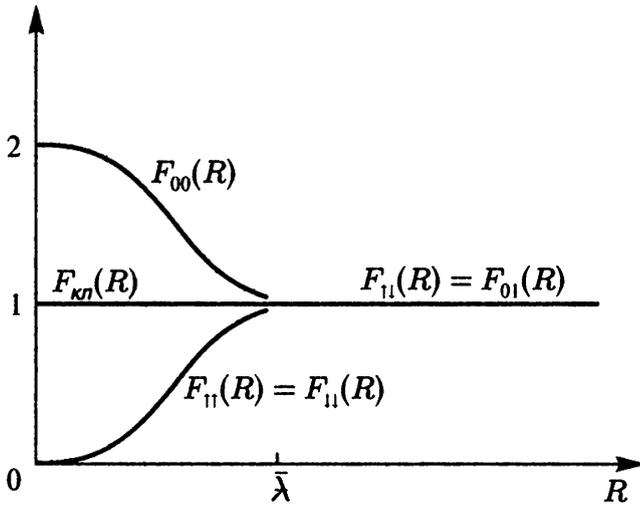


Рис. 5. Характер зависимости от расстояния между частицами системы парной корреляционной функции идеальных газов в невырожденном состоянии при $\theta \gg \theta_0$

Характерно, что квантовый эффект, связанный с различным пониманием принципа тождественности частиц в классической и квантовой теориях, проявляется, как и должно быть, на расстояниях порядка или меньших средней величины длины волны де Бройля $\bar{\lambda}$, связанной с тепловым движением частиц системы

$$R_{\text{корр}} \cong \bar{\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m\theta}}.$$

Попытки интерпретировать поведение парной корреляционной функции на малых расстояниях с помощью каких-либо динамических представлений, конечно же, антинаучны. Но, поддавшись такому соблазну и сопоставив полученный результат с классической наглядно

интерпретируемой формулой $F_2(R) \cong e^{-\Phi(R)/\theta}$, мы получили бы, что «бозевость» одинаковых по спину частиц на малых расстояниях как бы стягивает их вместе, а «фермиевость», в соответствии с принципом Паули, наоборот, их резко расталкивает.

Следующую квантовую поправку к полученному выше в «нулевом» порядке квазиклассическому результату достаточно просто получить, положив

$$n_p \cong e^{-E_p/\theta} \cdot e^{\mu/\theta} (1 \pm e^{-E_p/\theta} \cdot e^{\mu/\theta}),$$

где определяемое условием $\sum_p n_p = N$ значение величины $e^{\mu/\theta}$ будет с точностью до первой поправки иметь вид (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. б))

$$e^{\mu/\theta} = \frac{(2\pi\hbar)^3}{v(2\pi m\theta)^{3/2}} \left(1 \mp \frac{1}{2^{3/2}} \frac{(2\pi\hbar)^3}{v(2\pi m\theta)^{3/2}} \right).$$

Подставляя это значение $e^{\mu/\theta}$ в первое слагаемое для n_p и первый член в написанной выше формуле для $e^{\mu/\theta}$ в поправочный член для n_p , получаем, взяв несложные интегралы рассмотренного нами ранее гауссовского типа, для фурье-образа средних чисел заполнения

$$\frac{1}{V} \sum_p n_p e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} = \frac{1}{v} e^{-\frac{m\theta}{2\hbar^2}R^2} \pm \frac{1}{v} \frac{1}{2^{3/2}} \frac{(2\pi\hbar)^3}{v(2\pi m\theta)^{3/2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\theta}{2\hbar^2}R^2} (1 - e^{-\frac{1}{2} \frac{m\theta}{2\hbar^2}R^2}),$$

откуда после несложных арифметических действий следует выражение для $F_2(R)$ в следующем за нулевым квазиклассическом приближении

$$F_2(R) = 1 \pm e^{-\frac{m\theta}{\hbar^2}R^2} \left[1 \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(2\pi\hbar)^3}{v(2\pi m\theta)^{3/2}} \left(e^{\frac{1}{4} \frac{m\theta}{\hbar^2} R^2} - 1 \right) \right],$$

в качественном отношении мало что добавляющее к уже обсужденному нами основному результату для $F_2(R)$.

При переходе к рассмотрению вырожденного случая совместное рассмотрение бозе- и ферми-систем уже невозможно. Остановимся сначала на вырожденной ферми-системе. Имеем

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\infty} n_p p^2 dp \int_0^{\pi} e^{i p R \cos \vartheta} 2\pi \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar}{R} \int_0^{\infty} n_p \sin \frac{pR}{\hbar} \cdot p dp.$$

Ограничиваясь для вырожденного ферми-газа основным низкотемпературным результатом, положим $\theta = 0$. Тогда в интервале $0 \leq p \leq p_F$ $n_p = 1$, а при $p > p_F$ $n_p = 0$, где $p_F = \hbar(3\pi^2 N/V)^{1/3}$ (температурные поправки, которые лишь слегка размоют получающийся основной результат для $F_2(R)$, качественно не изменяют его характера, и любители фермиевских интегралов могут их аккуратно рассчитать, используя технику, изложенную в т. 2, гл. 2, § 2, п. б)). Беря интеграл по dp в интервале $0 \leq p \leq p_F$ дважды по частям, получаем, введя безразмерный параметр $x = p_F R / \hbar$,

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} = \frac{1}{v} \frac{3}{x^3} (\sin x - x \cdot \cos x) \cong \begin{cases} \frac{1}{v} \left(1 - \frac{x^2}{10} + \dots \right) & \text{в случае } x \ll 1, \\ \frac{1}{v} \left(-\frac{3 \cos x}{x^2} \right) & \text{в случае } x \gg 1, \end{cases}$$

что дает для парной корреляционной функции вырожденного ферми-газа характерный для подчиненных принципу Паули систем результат (рис. 6),

$$F_2(R) = 1 - \left[3 \left(\frac{\hbar}{p_F R} \right)^3 \left(\sin \frac{p_F R}{\hbar} - \frac{p_F R}{\hbar} \cos \frac{p_F R}{\hbar} \right) \right]^2 + O \left(\left(\frac{\theta}{\epsilon_F} \right)^2 \right).$$

Весь график $F_2(R)$ расположен ниже асимптоты $F_2(R)|_{R \rightarrow \infty} = 1$, лишь касаясь ее в точках, определяемых уравнением $x = \text{tg } x$ (т. е. в точках, которые с ростом параметра x все более приближаются к значениям $3\pi/2, 5\pi/2$ и т. д.), а в области $R \ll \hbar/p_F$ превращается в параболу, исходящую из точки $R = 0$,

$$F_2(R) \cong \frac{1}{5} \left(\frac{p_F R}{\hbar} \right)^2 = \frac{2}{5} \frac{m\epsilon_F}{\hbar^2} R^2.$$

Заметим, что если учесть, что в рассмотренном нами ранее классическом случае средняя энергия, приходящаяся на одну частицу системы, равна $\bar{\epsilon} = \frac{3}{2}\theta$, а в вырожденном случае $\bar{\epsilon} = \frac{3}{5}\epsilon_F$, то в обоих случаях поведение функции $F_2(R)$ в области малых значений $R \ll \sqrt{2\hbar^2/p^2} = \bar{\lambda}$ изобразится одной и той же формулой

$$F_2(R) \cong \frac{2}{3} \frac{m\bar{\epsilon}}{\hbar^2} R^2.$$

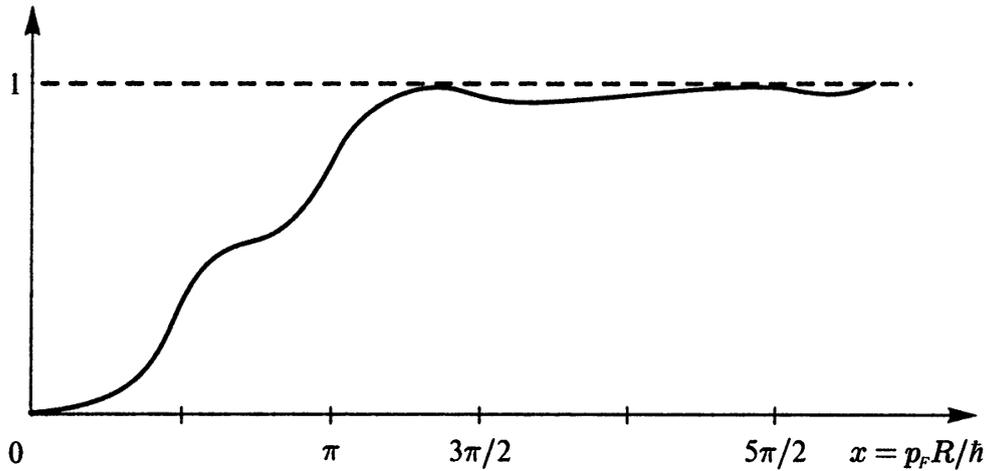


Рис. 6. Характер зависимости от расстояния между частицами парной корреляционной функции $F_2(R)$ идеального вырожденного ферми-газа

При рассмотрении вырожденного бозе-газа, как уже отмечалось в § 3, пользоваться теоремой о спариваниях для расчета средних величин по состояниям идеальной системы при $\theta < \theta_0$, когда макроскопическая часть общего числа частиц образует в импульсном пространстве так называемый конденсат

$$\langle N_0 \rangle = \langle a_0^+ a_0 \rangle = N \left(1 - \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{3/2} \right), \quad \theta_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \frac{4\Omega}{\zeta\left(\frac{2}{3}\right)^{3/2}} \cong 6,62 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3},$$

можно только по отношению к средним от произведений операторов a_p^+ и a_p с ненулевыми значениями импульса $p \neq 0$, так как величины, образующие спаривания в этом случае

$$\overline{a_p^+ a_{p'}} = \Delta(p - p') \langle a_p^+ a_p \rangle,$$

имеют необходимую при доказательстве указанной теоремы стандартную (в отличие от $\langle a_0^+ a_0 \rangle$) структуру бозе-распределения

$$\langle a_p^+ a_p \rangle = n_p = \frac{1}{e^{p^2/(2m\theta) - \mu/\theta} - 1},$$

в котором при $\theta < \theta_0$ химический потенциал μ отсутствует, т. е.

$$\mu = 0, \quad \Omega = \mathcal{F} \quad \text{и} \quad N = \langle N_0 \rangle + \sum_{p \neq 0} n_p$$

(в дальнейшем мы будем использовать индекс p , не оговаривая каждый раз, что $p \neq 0$).

Необходимо для дальнейшего отметить, что стандартная и общепринятая теория идеального бозе-газа, изложенная в т. 2, гл. 2, § 2, при тщательном теоретическом рассмотрении представляется, строго говоря, полуфеноменологической. Действительно, отказываясь от точной фиксации числа частиц, т. е. помещая систему внутрь воображаемого ящика, характеризуя ее макроскопическое состояние переменными θ , V , μ и используя большое каноническое распределение при расчетах средних значений, мы добились независимости друг от друга средних величин от комбинаций операторов, определяемых каждым из значений p (в частности, независимости друг от друга средних чисел заполнения $n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle$).

Оставаясь в рамках большого канонического распределения, мы еще в § 3 получили нефизический результат для дисперсии общего числа частиц при $\theta = 0$, именно, $\langle(\Delta N)^2\rangle = N^2 + N$. Если вспомнить, что при $\theta < \theta_0$ химический потенциал идеального бозе-газа теряет свою основную по N асимптотику,

$$\mu = -\lambda = -\frac{\theta}{\langle N_0 \rangle}$$

(т. е. в термодинамическом смысле $\mu = 0$), то получается, что формула для дисперсии $\langle(\Delta N)^2\rangle$, являющаяся следствием большого канонического распределения, уже при всех температурах $\theta < \theta_0$ приводит к аналогичному нефизическому результату

$$\langle(\Delta N)^2\rangle = \theta \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{V\theta} = \langle N_0 \rangle^2 \left(\frac{\partial \langle N_0 \rangle}{\partial N} \right)^{-1} = \langle N_0 \rangle^2 \sim N^2.$$

Но к этим результатам нельзя относиться серьезно, так как все формулы квазистатистической термодинамики, включающие даже дифференциалы физических параметров, являются постпредельными, и химический потенциал при $\theta < \theta_0$ — это нуль, а не величина, пропорциональная N^{-1} , так как такая зависимость противоречит обязательному для всех равновесных статистических систем принципу термодинамической аддитивности (см. т. 1, гл. 1, § 1). Можно привести еще примеры нефизического характера, возникающие при указанном выше рассмотрении вырожденной бозе-системы. Ограничимся только одним замечанием: воображаемые стенки могут не удержать внутри себя конденсат $\langle N_0 \rangle$, в частности, как показано в т. 2, задача к гл. 2 № 30, даже очень слабое однородное поле типа силы тяжести выводит из равновесной идеальной (только) бозе-системы весь конденсат, который оседает на дне сосуда, а сама система оказывается от него свободной.

Чтобы всего этого не происходило и можно было избавиться от нефизических следствий, в стандартной теории идеального бозе-газа предполагается, что число частиц в системе внутри объема V точно фиксировано, $N = \text{const}$, т. е. дисперсия $\langle(\Delta N)^2\rangle = 0$, что в формуле для θ_0 стоит именно это число, определяющее плотность газа N/V , что

$$N = \langle a_0^+ a_0 \rangle + \left\langle \sum_p a_p^+ a_p \right\rangle = \langle N_0 \rangle + \langle N' \rangle = N \left(1 - \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{3/2} \right) + N \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{3/2}$$

и что величина N теперь выносится за знак среднего как постоянное число, а независимость средних от комбинаций полевых операторов с одинаковым значением импульса p принимается как бы в асимптотическом смысле. Оставаясь по необходимости в рамках именно этого традиционного полуфеноменологического подхода, мы и рассчитаем парную корреляционную функцию идеального бозе-газа.

Остановимся сначала на вспомогательных соотношениях и рассмотрим величину $\langle N_0^2 \rangle$,

$$\langle a_0^+ a_0 a_0^+ a_0 \rangle = \langle (N - N')^2 \rangle = N^2 - 2N \langle N' \rangle + \langle N'^2 \rangle.$$

Подставляя в это выражение $N = \langle N_0 \rangle + \langle N' \rangle$, получаем, что

$$\langle N_0^2 \rangle = \langle N_0 \rangle^2 - \langle N' \rangle^2 + \langle N'^2 \rangle,$$

откуда следует естественный в предположении $N = \text{const}$ результат для дисперсий чисел частиц в конденсате и вне его,

$$\langle(\Delta N_0)^2\rangle = \langle(\Delta N')^2\rangle.$$

Поступая аналогичным образом с условием $\langle (\Delta N)^2 \rangle = 0$, получим

$$\langle (\Delta N)^2 \rangle = 0 = \langle (\Delta(N_0 + N'))^2 \rangle = \langle (\Delta N_0)^2 \rangle + \langle (\Delta N')^2 \rangle + 2(\langle N_0 N' \rangle - \langle N_0 \rangle \langle N' \rangle),$$

т. е. корреляция конденсатных и внеконденсатных чисел частиц будет определяться соотношением

$$\langle N_0 N' \rangle = \langle N_0 \rangle \langle N' \rangle - \langle (\Delta N_0)^2 \rangle.$$

Но, зафиксировав какое-либо значение $p \neq 0$, имеем

$$\begin{aligned} \langle a_0^+ a_0 a_p^+ a_p \rangle &= \left\langle \left(N - \sum_{p'} a_{p'}^+ a_{p'} \right) a_p^+ a_p \right\rangle = \\ &= N n_p - \left\langle \sum_{\substack{p' \\ (p' \neq p)}} a_{p'}^+ a_{p'} a_p^+ a_p \right\rangle - \langle a_p^+ a_p a_p^+ a_p \rangle = \\ &= N n_p - \sum_{\substack{p' \\ (p' \neq p)}} n_{p'} n_p - n_p (n_p + 1) = \\ &= \left(N - \sum_{p'} n_{p'} - 1 \right) n_p = (\langle N_0 \rangle - 1) n_p \stackrel{\text{as}}{=} \langle N_0 \rangle n_p, \end{aligned}$$

откуда следует, что

$$\langle N_0 N' \rangle = \left\langle a_0^+ a_0 \sum_p a_p^+ a_p \right\rangle = (\langle N_0 \rangle - 1) \sum_p n_p,$$

и поэтому для дисперсии числа конденсатных частиц получаем вполне разумную с точки зрения термодинамической теории флуктуаций величину

$$\langle (\Delta N_0)^2 \rangle = - \left\langle a_0^+ a_0 \sum_p a_p^+ a_p \right\rangle + \langle N_0 \rangle \sum_p n_p = \sum_p n_p = \langle (\Delta N')^2 \rangle \sim N^1.$$

Таким образом, исходя из равенства $N = \langle N_0 \rangle + \langle N' \rangle = \text{const}$, мы получили для дисперсии чисел N_0 , корреляции величин N_0 и N' и среднего от произведения четырех операторов с нулевыми импульсами асимптотические выражения

$$\begin{aligned} \langle (\Delta N_0)^2 \rangle &= \sum_p n_p = N \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{3/2}; \\ \langle N_0 N' \rangle &= (\langle N_0 \rangle - 1) \sum_p n_p \stackrel{\text{as}}{=} \langle N_0 \rangle \sum_p n_p = N^2 \left(1 - \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{3/2} \right) \cdot \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{3/2}; \\ \langle a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 \rangle &= \langle N_0^2 - N_0 \rangle = \langle N_0 \rangle^2 + \langle (\Delta N_0)^2 \rangle - \langle N_0 \rangle = \\ &= \langle N_0 \rangle^2 - N \left(1 - 2 \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{3/2} \right) \stackrel{\text{as}}{=} \langle N_0 \rangle^2. \end{aligned}$$

Следует обратить внимание, что с «рецептурной» точки зрения эти асимптотические результаты (за исключением формулы для $\langle (\Delta N_0)^2 \rangle$) могут быть получены

(конечно, чисто формально) с помощью замены операторов a_0^+ и a_0 на термодинамические величины $\sqrt{\langle N_0 \rangle}$, которые, естественно, выносятся за знак среднего, взятого по равновесным состояниям идеального газа с фиксированным числом частиц N . Именно такая же идея асимптотической замены операторов a_0^+/\sqrt{N} и a_0/\sqrt{N} на числа $\sqrt{N_0/N}$, названная процедурой приближенного вторичного квантования, была использована в известной работе Н. Н. Боголюбова (1946–1947), посвященной теории неидеального бозе-газа, на которой мы остановимся в дальнейшем, посвятив ей специальный параграф.

Переходя к непосредственному расчету парной корреляционной функции идеального бозе-газа

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2 - \mathbf{p}'_1 \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}'_2 \mathbf{r}_2)} v^2 \langle a_{\mathbf{p}_1}^+ a_{\mathbf{p}_2}^+ a_{\mathbf{p}'_2} a_{\mathbf{p}'_1} \rangle,$$

выделим операторы a_0^+ и a_0 , используем полученные нами заготовки и обозначим $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ и $R = |\mathbf{R}|$. Тогда будем иметь

$$\begin{aligned} F_2(R) &= \frac{v^2}{V^2} \langle a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 \rangle + \\ &+ \frac{v^2}{V^2} \sum_{\mathbf{p}} \langle a_0^+ a_0 a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \rangle (e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} + 1 + 1 + e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}) + \\ &+ \frac{v^2}{V^2} \left(\sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} \right)^2 + \frac{v^2}{V^2} \left| \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{R}} \right|^2 \stackrel{\text{as}}{=} \\ &\stackrel{\text{as}}{=} \frac{v^2}{V^2} \langle N_0 \rangle^2 + \frac{v^2}{V^2} \langle N_0 \rangle 2 \left(\sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{R}} \right) + \\ &+ \frac{v^2}{V^2} (N - \langle N_0 \rangle)^2 + \frac{v^2}{V^2} \left| \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{R}} \right|^2, \end{aligned}$$

или окончательно, приведя подобные члены,

$$F_2(R) = 1 + 2 \frac{\langle N_0 \rangle}{N} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{R}} + \left| \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \mathbf{R}} \right|^2.$$

Заметим, что эта же формула для $F_2(R)$ может быть получена из иных соображений. Предположим, что между частицами бозе-газа появилось очень слабое фиктивное взаимодействие $\Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$, которое в пределе мы, конечно, выключим. Тогда появится среднее значение от гамильтониана взаимодействия частиц друг с другом

$$\begin{aligned} \langle H_1 \rangle &= \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{p} \mathbf{p}' \mathbf{q} \\ \text{по всем}}} \nu(q) \langle a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}} \rangle = \\ &= \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) + \frac{\langle N_0 \rangle}{V} \sum_{\mathbf{q}} \nu(q) n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \mathbf{q}} \nu(q) n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} n_{\mathbf{p}}. \end{aligned}$$

Полагая теперь, что $\langle a_0^+ a_0 a_p^+ a_p \rangle \stackrel{\text{as}}{=} \langle N_0 \rangle n_p$, и вспоминая, что

$$F_2(R) = \frac{2v}{N} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \Phi(R)}; \quad \nu(0) = \int \Phi(R) d\mathbf{R}; \quad \nu(q) = \int \Phi(R) e^{i\mathbf{qR}} d\mathbf{R},$$

и что в исчезающе малом первом порядке функционально зависящая от $\Phi(R)$ часть свободной энергии

$$\Delta \mathcal{F} = \int_0^1 dg \langle H_1 \rangle^{(g)} = \langle H_1 \rangle,$$

получаем, беря вариационную производную, для парной корреляционной функции в пределе идеального газа при $\Phi(R) \rightarrow 0$

$$F_2(R) = \frac{2v}{N} \frac{\delta \langle H_1 \rangle}{\delta \Phi(R)} = \frac{2v}{N} \frac{N(N-1)}{2V} + \frac{2v}{N} \frac{\langle N_0 \rangle}{V} \sum_q e^{i\mathbf{qR}} n_q + \frac{2v}{N} \frac{1}{2V} \sum_{pq} e^{i\mathbf{qR}} n_{p+q} n_p,$$

т. е. в точности тот же результат, что и полученный нами ранее, так как

$$\frac{1}{N^2} \sum_{pq} e^{i\mathbf{qR}} n_{p+q} n_p = \frac{1}{N^2} \sum_{pp'} e^{i\mathbf{(p-p')R}} n_p n_{p'} = \left| \frac{1}{N} \sum_p e^{i\mathbf{pR}} n_p \right|^2.$$

Расчет фурье-образа функции n_p

$$\begin{aligned} I(R) &= \frac{1}{N} \sum_p n_p e^{i\mathbf{pR}} = \frac{v}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{e^{p^2/(2m\theta)} - 1} 2\pi \int_{-1}^1 e^{i\mathbf{pR}x} dx = \\ &= \frac{4\pi v}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{1}{e^{p^2/(2m\theta)} - 1} \frac{\sin(pR/\hbar)}{pR/\hbar} p^2 dp \end{aligned}$$

до конца в аналитическом виде осуществить не удастся. В связи с этим рассмотрим, как всегда, крайние случаи больших и малых значений R .

а) Случай $R \rightarrow \infty$. Учитывая, что

$$\left. \frac{\sin kp}{p} \right|_{k \rightarrow \infty} \rightarrow \delta(p), \quad \text{где} \quad k = \frac{R}{\hbar},$$

получаем в самом грубом приближении в области значений $R \gg \tilde{R} = \pi\hbar/\sqrt{2m\theta}$

$$I(R) = \frac{4\pi v}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar}{R} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2}{e^{p^2/(2m\theta)} - 1} \frac{\sin(pR/\hbar)}{p} dp \cong \frac{vm\theta}{2\pi^2\hbar^3} \frac{1}{R}.$$

Таким образом, на больших расстояниях в корреляционной функции $F_2(R)$ в том же приближении появляется дальнедействующая составляющая

$$F_2(R) = 1 + 2 \frac{\langle N_0 \rangle}{N} \frac{vm\theta}{2\pi^2\hbar^3} \frac{1}{R} + \dots,$$

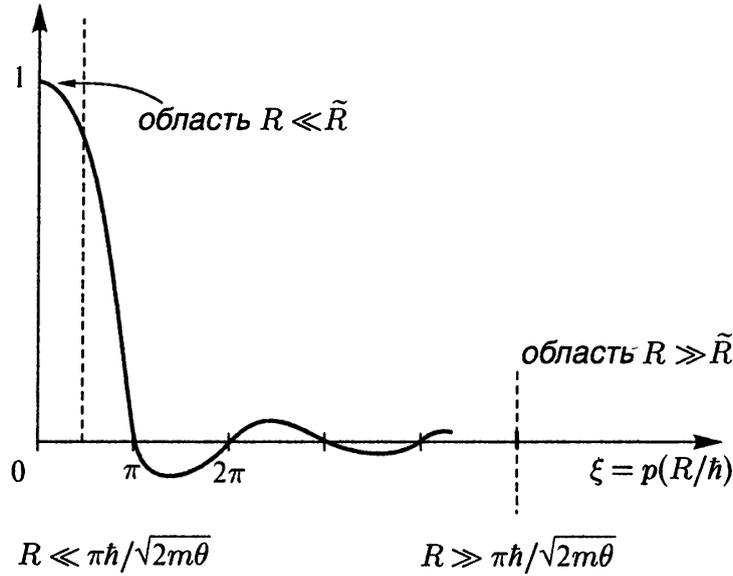


Рис. 7. График функции $\sin(pR/\hbar)/(pR/\hbar)$, стоящей под знаком интеграла, определяющего фурье-образ бозе-распределения n_p ; $\tilde{R} = \pi\hbar/\sqrt{2m\theta}$

убывающая по закону $1/R$ (т. е. в вырожденном идеальном бозе-газе возникает своеобразный дальний порядок, исчезающий с повышением температуры до уровня θ_0).

б) Случай $R \rightarrow 0$. Учитывая, что в случае $R \ll \tilde{R} = \pi\hbar/\sqrt{2m\theta}$ (см. рис. 7)

$$\frac{\sin x}{x} = 1 - \frac{x^2}{6} + \dots$$

получаем

$$I(R) = \frac{N - \langle N_0 \rangle}{N} - AR^2 + \dots,$$

где

$$A = \frac{4\pi v}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{6} \frac{(2m\theta)^{5/2}}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} = \frac{4\pi v}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{12} \frac{(2m\theta)^{5/2}}{\hbar^2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right),$$

где дзета-функция Римана и гамма-функция соответственно равны

$$\zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1,341\dots, \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}.$$

Подставляя полученную аппроксимацию для $I(R)$ в выражение для корреляционной функции, получаем после приведения подобных членов

$$F_2(R) = \frac{2N^2 - \langle N_0 \rangle^2}{N^2} - 2AR^2 + \dots$$

Таким образом, общий характер зависимости корреляционной функции вырожденного идеального бозе-газа от расстояния между частицами приобретает окончательный

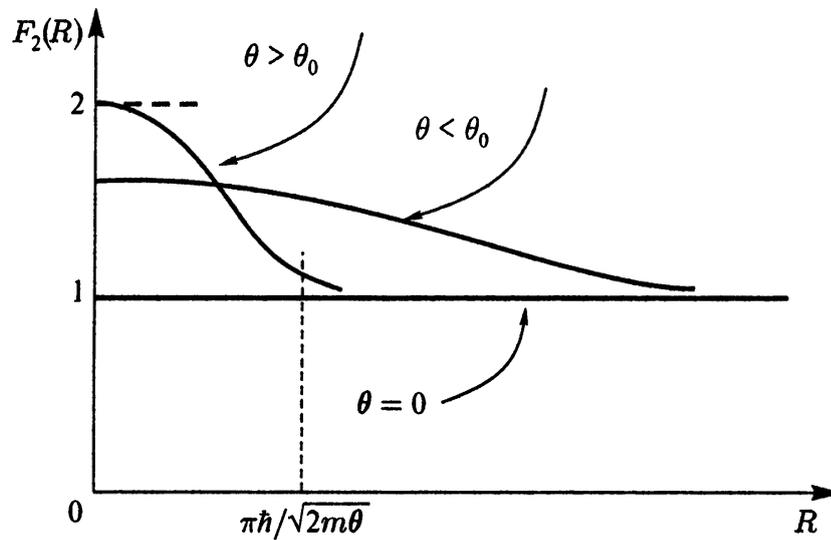


Рис. 8. Характер зависимости от расстояния между частицами парной корреляционной функции $F_2(R)$ идеального бозе-газа в случаях $\theta > \theta_0$, $\theta < \theta_0$ и $\theta = 0$

вид (см. рис. 8)

$$F_2(R) = \begin{cases} 1 + \frac{\langle N_0 \rangle}{N} \frac{4v(2m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m\theta}R} + \dots & \text{в случае } R \gg \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m\theta}}, \\ 2 - \left(\frac{\langle N_0 \rangle}{N}\right)^2 - \frac{2}{3}\pi^3 \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \frac{v(2m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{2m\theta}{\pi^2\hbar^2} R^2 + \dots & \text{в случае } R \ll \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m\theta}}. \end{cases}$$

Двухвременные корреляционные функции и функции Грина

Приступая к исследованию конкретных физических систем, теоретическому истолкованию их специфических особенностей или происходящих с ними явлений и связывая эти особенности с учетом прямого взаимодействия частиц друг с другом или с другими полями, индуцирующими это взаимодействие, необходимо использовать не только результаты, вытекающие из физических особенностей системы, что позволяет правильно смоделировать постановочную часть задач микроскопической теории, проявив при этом определенную интуицию, но и рационально выбрать тот математический аппарат, с помощью которого поставленная задача с той или иной степенью полноты будет решаться.

В этом вопросе нет заранее predetermined однозначности. Но все же, из упомянутых в предыдущем параграфе методов рассмотрения неидеальных систем, динамическая теория возмущений удобна при рассмотрении в основном глубоко вырожденных ферми-систем (т. е. случая $\theta = 0$), так как безусловная применимость теории Вика в этом случае провоцирует фактически прямой перенос квантово-полевой диаграммной техники с убедительно интерпретируемыми процедурами суммирования основных вкладов в каждом из порядков теории возмущений, перенормировками взаимодействия, сопоставлением линий частиц (т. е. одночастичных функций Грина) с квантово-механическими пропагаторами и т. д. Но, как уже указывалось нами, эта техника нацелена в основном на решение квантово-механической задачи N тел, а во временном аспекте — на исследование ранних стадий эволюционных процессов, происходящих в подобных системах.

Наоборот, упомянутая в том же параграфе термодинамическая теория возмущений не содержит временного аргумента, исследуемая с ее помощью система является равновесной, а квантово-полевая техника, искусственно в нее введенная, откровенно формальна (обратная температура $\beta = 1/\theta$ меняется в ней от нуля, т. е. от значения $\theta = +\infty$, до разумных значений, может принимать комплексные значения и т. д., что в непосредственную физическую интерпретацию не укладывается).

Предлагаемый в данной главе метод в некотором смысле является компромиссным: во-первых, он температурный, что позволяет исследовать именно термодинамические состояния систем, температура которых никогда не бывает равной нулю (т. е. системы, в которых понятие термодинамического состояния уже образовалось), а во-вторых, включение в рассмотрение времени в качестве динамического параметра позволяет не только рассматривать ряд кинетических проблем, но и с помощью спектральных представлений выявлять резонансные особенности системы. Конечно, за все надо расплачиваться: в данной формально двухвременной, а фактически одновременной технике диаграммные представления, столь модные несколько десятилетий назад, могут служить лишь иллюстрацией, но не элементами регулярного

метода расчета типа теории возмущений по константе взаимодействия частиц друг с другом или частицами иного сорта (см. более подробно гл. 6, § 1).

Остановимся на основных моментах этого двухвременного температурного метода, откладывая до специального параграфа вопрос о том, откуда генетически, т. е. из каких физических задач возникли предлагаемые в нашем рассмотрении математические конструкции и насколько они рациональны.

§ 1. Двухвременные корреляционные функции и их спектральные представления

Обозначим $\mathcal{H} = H - \mu N$, где H — гамильтониан системы, угловыми скобками — операцию взятия среднего с помощью большого канонического распределения Гиббса

$$\langle \dots \rangle = \text{Sp} \{ \rho \dots \}, \quad \rho = \frac{e^{-\mathcal{H}/\theta}}{\text{Sp} e^{-\mathcal{H}/\theta}} = \frac{1}{\zeta} e^{-\mathcal{H}/\theta}$$

и введем квазигейзенберговское («квази» — потому что с химическим потенциалом μ и оператором \mathcal{H} вместо гамильтониана H) представление операторов динамических величин (как правило, выражающихся в представлении вторичного квантования через комбинации операторов рождения и уничтожения, хотя возможны и любые другие представления)

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} A e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t},$$

подчиненных формальному уравнению движения

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial A(t)}{\partial t} = [\mathcal{H}, A(t)]_-,$$

и определим двухвременную корреляционную функцию $\langle A(t)B(t') \rangle$, которая, согласно приведенным выше соотношениям и свойству операции Sp по отношению к циклическим перестановкам усредняемых операторов, оказывается однородной функцией времени (т. е. зависит не порознь от t и t' , а только от их разности $t - t'$):

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= \frac{1}{\zeta} \text{Sp} \left\{ e^{-\mathcal{H}/\theta} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} A e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} (t-t')} B e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t'} \right\} = \\ &= \frac{1}{\zeta} \text{Sp} \left\{ e^{-\mathcal{H}/\theta} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} (t-t')} A e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} (t-t')} B \right\} = \langle A(t-t')B \rangle = \langle AB(t' - t) \rangle. \end{aligned}$$

Таким образом, в дальнейших выкладках можно распределить роли между операторами, обозначаемыми буквами A и B : оператор B будем определять в момент времени $t' = 0$, тогда оператор A будет брать на себя как бы всю нагрузку зависимости от интервала времени $t - t' = t$. В результате появляются две корреляционные конструкции — уже упомянутая $\langle A(t)B \rangle$ и родственная ей $\langle BA(t) \rangle$. Эти корреляционные функции генетически связаны между собой. Действительно, объединяя стоящие в экспоненте операторы в одно слагаемое

$$-\frac{\mathcal{H}}{\theta} + \frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t = \frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \left(t - \frac{\hbar}{i\theta} \right) = \frac{i}{\hbar} \mathcal{H} (t + i\hbar\beta),$$

получаем

$$\begin{aligned}\langle A(t)B \rangle &= \frac{1}{\zeta} \text{Sp} \left\{ e^{-\mathcal{H}/\theta} e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}t} A e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}t} e^{\mathcal{H}/\theta} e^{-\mathcal{H}/\theta} B \right\} = \\ &= \frac{1}{\zeta} \text{Sp} \left\{ e^{-\mathcal{H}/\theta} B e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-\hbar/(i\theta))} A e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-\hbar/(i\theta))} \right\} = \left\langle BA \left(t - \frac{\hbar}{i\theta} \right) \right\rangle.\end{aligned}$$

Поэтому в дальнейшем можно основное внимание уделять корреляционной функции $\langle BA(t) \rangle$, считая ее «родоначальницей» всего метода, а если потребуется получить из нее функции $\langle A(t)B \rangle$, достаточно будет произвести замену временного аргумента $t \rightarrow \tilde{t} = t + i\hbar\beta$ в среднем $\langle BA(t) \rangle$.

Заметим, что при $t = 0$ введенные выше средние величины превращаются в традиционные статистические корреляционные функции, рассмотренные в § 4 предыдущей главы, например,

$$\langle p' | F_1 | p \rangle = v \langle a_p^+ a_{p'} \rangle, \quad \langle p'_1, p'_2 | F_2 | p_1, p_2 \rangle = v^2 \langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p'_2} a_{p'_1} \rangle$$

и т. д., где, опуская множители v и v^2 , в первом случае $B = a_p^+$, $A = a_{p'}$, а во втором разбиение произведения четырех операторов на A и B уже неоднозначно и возникает в каком-либо из вариантов при рассмотрении конкретных задач.

Перейдем к частотному представлению (обычно именуемому спектральным) временной корреляционной функции $\langle BA(t) \rangle$, определяемому с помощью преобразования Фурье

$$\langle BA(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t} J(B, A; \omega), \quad J(B, A; \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar} \omega t} \langle BA(t) \rangle.$$

Фурье-образ $J(B, A; \omega)$ корреляционной функции $\langle BA(t) \rangle$, называемый ее спектральной плотностью, является функцией частоты ω (для единообразия с другими формулами мы будем выражать ее в энергетических единицах, $\omega = \hbar\omega_{\text{кл}}$, где $\omega_{\text{кл}}$ — обычная классическая круговая частота) и условных «операторных» аргументов A и B (условных, так как от самих операторных конструкций после взятия среднего $\langle \dots \rangle$ кроме воспоминаний уже ничего не остается, если не считать численных коэффициентов), по отношению к которым как сама корреляционная функция $\langle BA(t) \rangle$, так и ее спектральная плотность $J(B, A; \omega)$ являются линейными функциями A и B , например,

$$\begin{aligned}\langle (c_1 B_1 + c_2 B_2) A(t) \rangle &= c_1 \langle B_1 A(t) \rangle + c_2 \langle B_2 A(t) \rangle, \\ J(c_1 B_1 + c_2 B_2, A; \omega) &= c_1 J(B_1, A; \omega) + c_2 J(B_2, A; \omega).\end{aligned}$$

Если использовать в принципе существующее энергетическое представление для операторов A и B , т. е. использовать собственные функции оператора $\mathcal{H} = H - \mu N$,

$$\mathcal{H} |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle, \quad e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}t} |n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_n t} |n\rangle,$$

то в этом представлении

$$\begin{aligned}\langle BA(t) \rangle &= \frac{1}{\zeta} \sum_{nmk} \langle n | B | m \rangle \langle m | e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}t} A e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}t} | k \rangle \langle k | e^{-\mathcal{H}/\theta} | n \rangle = \\ &= \frac{1}{\zeta} \sum_{nm} e^{-\varepsilon_n/\theta} e^{-\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_n - \varepsilon_m)t} \langle n | B | m \rangle \langle m | A | n \rangle,\end{aligned}$$

откуда, переходя к частотному представлению и учитывая, что

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega)t} dt = \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega),$$

следует общая формула для спектральной плотности

$$J(B, A; \omega) = \frac{1}{\zeta} \sum_{nm} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\varepsilon_n/\theta} \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega).$$

Прямым следствием этой записанной в энергетическом представлении достаточно условной формулы являются несколько важных для дальнейшего общих для спектральной плотности $J(B, A; \omega)$ соотношений.

Если мы захотим узнать спектральную плотность корреляционной функции $\langle A(t)B \rangle$,

$$\langle A(t)B \rangle = \langle AB(-t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(A, B; \omega) e^{\frac{i}{\hbar}\omega t} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} J(A, B; -\omega) e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t} d\omega,$$

то, произведя замены в общей формуле для $J(B, A; \omega)$: $A \leftrightarrow B$, $n \leftrightarrow m$ и $\omega \rightarrow -\omega$, получим

$$\begin{aligned} J(A, B; -\omega) &= \frac{1}{\zeta} \sum_{mn} \langle m|A|n\rangle \langle n|B|m\rangle e^{-\varepsilon_m/\theta} \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n + \omega) = \\ &= \frac{1}{\zeta} \sum_{nm} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\varepsilon_n/\theta} \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega) e^{\omega/\theta}, \end{aligned}$$

откуда следует связь спектральных плотностей корреляционных функций $\langle BA(t) \rangle$ и $\langle A(t)B \rangle$,

$$J(A, B; -\omega) = e^{\omega/\theta} J(B, A; \omega),$$

которую, впрочем, можно было усмотреть также, сопоставив написанное выше спектральное разложение корреляционной функции $\langle A(t)B \rangle$ с формулой

$$\langle A(t)B \rangle = \left\langle BA \left(t - \frac{\hbar}{i\theta} \right) \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(B, A; \omega) e^{\omega/\theta} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t} d\omega.$$

Если у нас возникнет необходимость в использовании спектральной плотности корреляционной функции

$$\langle B[A(t), \mathcal{H}]_- \rangle = \langle B(A(t)\mathcal{H} - \mathcal{H}A(t)) \rangle,$$

то согласно общей формуле для спектральной плотности, записанной в энергетическом представлении, имеем

$$\begin{aligned} J(B, [A, \mathcal{H}]_-; \omega) &= \frac{1}{\zeta} \sum_{nm} \langle n|B|m\rangle \langle m|A\mathcal{H} - \mathcal{H}A|n\rangle e^{-\varepsilon_n/\theta} \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega) = \\ &= \frac{1}{\zeta} \sum_{nm} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle (\varepsilon_n - \varepsilon_m) e^{-\varepsilon_n/\theta} \delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega), \end{aligned}$$

откуда, вынося $\varepsilon_n - \varepsilon_m = \omega$ за знак суммы по n и m , получаем

$$J(B, [A, \mathcal{H}]_-; \omega) = \omega J(B, A; \omega).$$

Это соотношение можно получить и непосредственно, дифференцируя корреляционную функцию $\langle BA(t) \rangle$ по времени и учитывая уравнение движения для оператора $A(t)$ в квазигейзенберговском представлении,

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \langle BA(t) \rangle = \begin{cases} \langle B[A(t), \mathcal{H}]_- \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(B, [A, \mathcal{H}]_-; \omega) e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t}, \\ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(B, A; \omega) e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega J(B, A; \omega) e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t}. \end{cases}$$

По мере надобности можно получить еще целый ряд подобных соотношений, являющихся прямым следствием гиббсовской структуры смешанного состояния равновесной статистической системы и общих правил перехода от временного к частотному фурье-представлению, например,

$$J([\mathcal{H}, B]_-, A; \omega) = \omega J(B, A; \omega), \\ \omega J(A, B; \omega) = J(A, [\mathcal{H}, B]_-; \omega) = J([A, \mathcal{H}]_-, B; \omega) \quad \text{и т. д.}$$

Установленная выше связь спектральных плотностей, содержащих в качестве операторных аргументов оператор A и его коммутатор с гамильтонианом $[A, \mathcal{H}]_-$, по существу, отражает ту цепочку уравнений для корреляционных величин разного и все возрастающего ранга, существование которой характерно вообще для всех задач статистической механики неидеальных систем (см. т. 2, т. 3, а также гл. 1, § 4). Это обстоятельство не является случайным, так как исходящие из общего уравнения движения Лиувилля—фон Неймана, превращающего производную по времени в коммутатор $[\rho, \mathcal{H}]_-$, уравнения для корреляционных операторов автоматически устанавливают связь средних от необходимых при проведении конкретных исследований системы операторов A и B с коммутаторами этих операторов с гамильтонианом. Если учесть, что в большинстве случаев в коммутаторе $[A, \mathcal{H}]_-$ удастся выделить структуру, повторяющую конструкцию оператора A (например, как это произошло в случае системы с парным взаимодействием частиц друг с другом, см. гл. 1, § 4),

$$[A, \mathcal{H}]_- = \varepsilon_A A + A',$$

то последнее из полученных соотношений для спектральных плотностей приобретает вид уравнения

$$(\omega - \varepsilon_A) J(B, A; \omega) = J(B, A'; \omega),$$

которое, будучи повторенным по отношению к спектральной плотности $J(B, A'; \omega)$, содержащей, как правило, более сложный оператор A' (построенный из большего числа полевых операторов, чем исходный оператор A), превращается в цепочку уравнений для корреляционных функций, выраженную не во временном варианте, а в спектральной форме.

В следующем параграфе мы разовьем эту идею в более конструктивной и практически более удобной форме.

§ 2. Двухвременные температурные функции Грина

а) Спектральные представления функций Грина на \mathcal{E} -плоскости

Введем с помощью спектральной плотности $J(B, A; \omega)$ энергетическое представление функции

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J(B, A; \omega)(e^{\omega/\theta} - \eta)}{\mathcal{E} - \omega} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{\mathcal{E} - \omega},$$

где $J'(B, A; \omega) = (e^{\omega/\theta} - \eta)J(B, A; \omega)$, а величина η по усмотрению может приниматься равной $\eta = +1$ или $\eta = -1$. Эту величину (целесообразность выбранной для нее конструкции в виде интеграла типа Коши мы оправдаем только в следующем параграфе), определяемую спектральным разложением всюду, кроме действительной оси энергии E , мы будем называть функцией Грина на \mathcal{E} -плоскости (при этом $\text{Im } \mathcal{E} \neq 0$).

Умножая это определение слева на \mathcal{E} , а справа под интегралом на комбинацию $(\mathcal{E} - \omega) + \omega$, учитывая, что первое слагаемое справа приводит к не зависящему от времени среднему от коммутатора или антикоммутатора операторов A и B ,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (J(B, A; \omega)e^{\omega/\theta} - \eta J(B, A; \omega)) = \int_{-\infty}^{+\infty} (J(A, B; -\omega) - \eta J(B, A; \omega)) d\omega = \langle AB - \eta BA \rangle,$$

и что второе слагаемое вследствие равенства $\omega J(B, A; \omega) = J(B, [A, \mathcal{H}]_-; \omega)$ определяет функцию Грина, связанную уже со спектральной плотностью $J(B, [A, \mathcal{H}]_-; \omega)$, получаем общее уравнение

$$\mathcal{E} \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \langle AB - \eta BA \rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]_- | B \rangle\rangle_{\mathcal{E}},$$

которое, согласно сказанному в конце предыдущего пункта, представляет собой символическую запись цепочки уравнений для функций Грина все возрастающего ранга:

$$(\mathcal{E} - \varepsilon_A) \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \langle AB - \eta BA \rangle + \langle\langle A' | B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}.$$

б) Обратное соотношение: выражение спектральной плотности через функцию Грина

Если воспользоваться известным из теории функций комплексного переменного условным соотношением

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} \Big|_{\substack{\varepsilon > 0 \\ \varepsilon \rightarrow 0}} = \frac{P}{x} \mp i\pi\delta(x),$$

где символ P обозначает операцию взятия главного значения при последующем интегрировании по действительной переменной x , то с помощью его следствия,

$$\left(\frac{1}{x + i\varepsilon} - \frac{1}{x - i\varepsilon} \right)_{\varepsilon \rightarrow 0} = -2\pi i\delta(x),$$

мы можем в интеграле, определяющем функцию $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, снять интегрирование по частоте ω , что сразу приводит к выражению для спектральной плотности через значения функции Грина по разным берегам действительной оси энергии E ,

$$J'(B, A; \omega) = -\frac{1}{2\pi i} (\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega + i\varepsilon} - \langle\langle A|B \rangle\rangle_{\omega - i\varepsilon})_{\varepsilon \rightarrow 0}.$$

В частном, но довольно распространенном случае, когда $B = A^+$ и спектральная плотность $J(A^+, A; \omega)$ действительна, имеем более простое соотношение

$$J'(A^+, A; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\langle A|A^+ \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon}.$$

Переход к спектральной плотности $J(B, A; \omega) = J'(B, A; \omega)/(e^{\omega/\theta} - \eta)$ в случае $\eta = -1$ не составляет труда. Однако при ином выборе параметра $\eta = +1$ вследствие очевидного соотношения $(e^{\omega/\theta} - 1)\delta(\omega) = 0$ спектральная плотность $J(B, A; \omega)$ восстанавливается из $J'(B, A; \omega)$ (т. е. из функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\epsilon}$) всюду, кроме точки $\omega = 0$, т. е. с точностью до слагаемого $\text{const} \cdot \delta(\omega)$ («резонанс» на нулевой частоте), присутствие которого в спектральной плотности определяется дополнительными соображениями по поводу структуры средних $\langle BA \rangle$ или с помощью апелляции к случаю $\eta = -1$.

Мы установили, таким образом, что введенная выше конструкция $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\epsilon}$ как функция комплексной величины энергии \mathcal{E} имеет несовпадающие значения по разным берегам действительной оси E (см. рис. 9). Причем, ввиду того что среднее значение $\langle BA \rangle$ изначально предполагается существующим, т. е. спектральная плотность $J(B, A; \omega)$, определяющая это среднее, не является тождественным нулем, значения функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\epsilon}$ вдоль берегов $E + i\epsilon$ и $E - i\epsilon$ представляются отличающимися друг от друга аналитическими функциями, анализ которых представляет уже самостоятельный интерес.

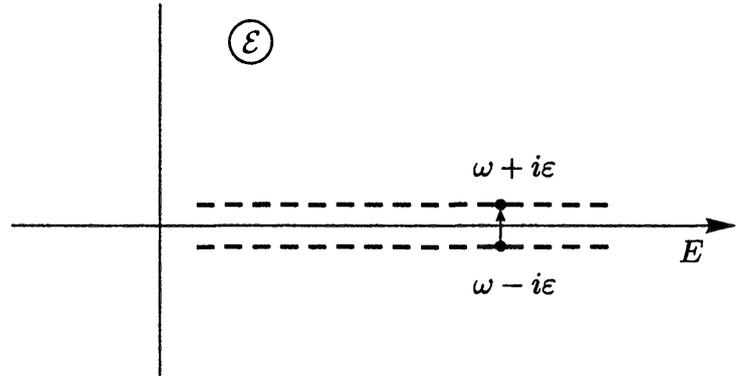


Рис. 9. Разрез, являющийся границей областей существования функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\epsilon}$ на комплексной плоскости \mathcal{E} , пересечение которого сопровождается скачком функции $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\epsilon}$, определяющим спектральную плотность $J'(B, A; \omega)$

в) Запаздывающие и опережающие функции Грина

Определим две функции, $G^{\text{ret}}(A, B; E)$ и $G^{\text{adv}}(A, B; E)$ действительного энергетического аргумента E как предельные значения функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\epsilon}$ сверху и снизу действительной оси E ,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle\langle A|B \rangle\rangle_{E \pm i\epsilon} = G^{\text{ret}}(A, B; E).$$

Будучи функциями действительного аргумента E , они имеют соответствующие временные представления, определяемые стандартным преобразованием Фурье,

$$G^{\text{adv}}(A, B; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} G^{\text{adv}}(A, B; E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - \omega \pm i\epsilon}.$$

Замечая, что зависимость от E подынтегрального выражения полностью определена, и вычисляя интеграл по этой переменной, замыкая контур интегрирования при значениях $t < 0$ сверху, а при значениях $t > 0$ снизу (рис. 10), и вспоминая, что

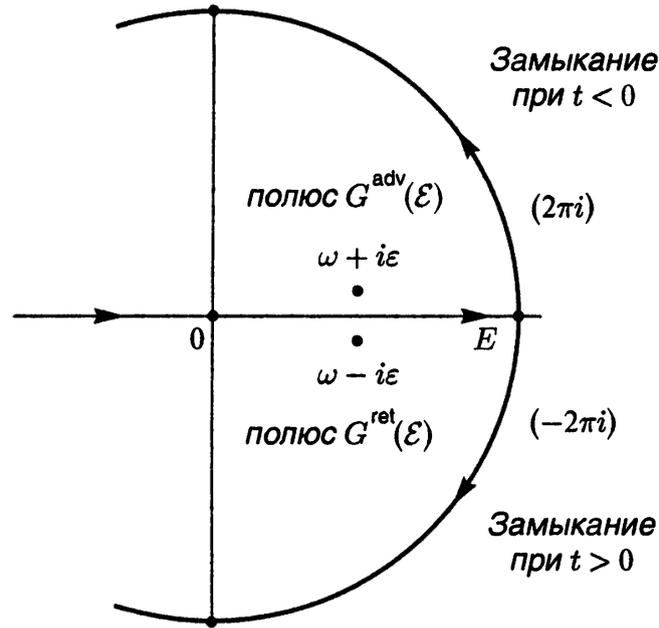


Рис. 10. Замыкание контуров интегрирования при взятии интеграла по энергетической переменной E в случаях $t > 0$ и $t < 0$

согласно лемме Жордана интегралы по таким замыкающим контур полуокружностям в пределе $R \rightarrow \infty$ равны нулю, получаем, беря вычеты соответственно в точках $\mathcal{E} = \omega - i\epsilon$ для G^{ret} и $\mathcal{E} = \omega + i\epsilon$ для G^{adv} ,

$$G^{\text{adv}}_{\text{ret}}(A, B; t) = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm t) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t - \frac{\epsilon}{\hbar}|t|} (J(B, A; \omega) e^{\omega/\theta} - \eta J(B, A; \omega)),$$

где для стандартной ступенчатой функции мы использовали обозначение

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } \tau > 0, \\ 0 & \text{в случае } \tau < 0. \end{cases}$$

Таким образом, мы получили, что во временном представлении береговые значения функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{E \pm i\epsilon}$ имеют вид средних от запаздывающего или опережающего коммутатора (или антикоммутатора) операторов $A(t)$ и B .

$$G^{\text{adv}}_{\text{ret}}(A, B; t) = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm t) \langle A(t)B - \eta BA(t) \rangle,$$

что и оправдывает используемую для этих функций Грина терминологию.

Отметим еще несколько очевидных, но используемых в дальнейшем соотношений для запаздывающей и опережающей функций Грина,

$$G^{\text{adv}}_{\text{ret}}(A, B; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - \omega \pm i\epsilon} = P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - \omega} \mp i\pi J'(B, A; E),$$

откуда еще раз

$$J(B, A; E) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{G^{\text{ret}}(A, B; E) - G^{\text{adv}}(A, B; E)}{e^{E/\theta} - \eta}$$

и откуда следуют интегральные связи действительной и мнимой частей функций Грина (так называемые дисперсионные соотношения), простейшая из которых в случае $B = A^+$ имеет вид

$$\operatorname{Re} G_{\text{adv}}^{\text{ret}}(A, A^+; E) = \mp \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\operatorname{Im} G_{\text{adv}}^{\text{ret}}(A, A^+; \omega)}{E - \omega}.$$

г) Аналитические свойства функций Грина на энергетической плоскости

Подытожим теперь выявленные аналитические свойства введенных функций Грина. Положим, что запаздывающая функция Грина $G^{\text{ret}}(E)$ (операторных аргументов временно отмечать не будем) существует при всех значениях аргумента E , т. е. сходится интеграл по временной переменной t

$$G^{\text{ret}}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}Et - \frac{\varepsilon}{\hbar}|t|} G^{\text{ret}}(t) = \int_0^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} G^{\text{ret}}(t).$$

Тогда эта величина заведомо существует и для сдвинутого в комплексную область ее аргумента $\mathcal{E} = E + i\Gamma$ при всех значениях $\Gamma > 0$ (т. е. во всей верхней полуплоскости аналитическое продолжение функции $G^{\text{ret}}(E)$ не имеет особенностей),

$$|G^{\text{ret}}(E + i\Gamma)| = \left| \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} G^{\text{ret}}(t) e^{-\Gamma t} \right| < |G^{\text{ret}}(E)| < \infty,$$

причем это аналитическое продолжение функции $G^{\text{ret}}(E)$ в верхнюю полуплоскость совпадает с функцией Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$,

$$G^{\text{ret}}(E + i\Gamma) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E + i\Gamma - \omega} = \langle\langle A|B \rangle\rangle_{E+i\Gamma}.$$

Так как функция $G^{\text{ret}}(E)$ не равна тождественно нулю, то ненулевые значения $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$ на плоскости энергии должны поддерживаться особенностями этой функции, которые могут быть расположены лишь в нижней полуплоскости энергии (рис. 11).

Совершенно аналогично, из факта существования функции $G^{\text{adv}}(E)$ на действительной оси энергии,

$$G^{\text{adv}}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}Et - \frac{\varepsilon}{\hbar}|t|} G^{\text{adv}}(t) = \int_{-\infty}^0 dt e^{\frac{i}{\hbar}(E-i\varepsilon)t} G^{\text{adv}}(t),$$

следует, что при аналитическом продолжении ее в нижнюю полуплоскость энергии $\mathcal{E} = E - i\Gamma$, $\Gamma > 0$, она не обнаруживает никаких особенностей (т. е. ее особенности как аналитической функции располагаются в верхней полуплоскости энергии) и будет совпадать с функцией Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{E-i\Gamma}$,

$$G^{\text{adv}}(E - i\Gamma) = \int_{-\infty}^0 dt e^{\frac{i}{\hbar}(E-i\varepsilon)t} G^{\text{adv}}(t) e^{\Gamma t} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - i\Gamma - \omega} = \langle\langle A|B \rangle\rangle_{E-i\Gamma}.$$

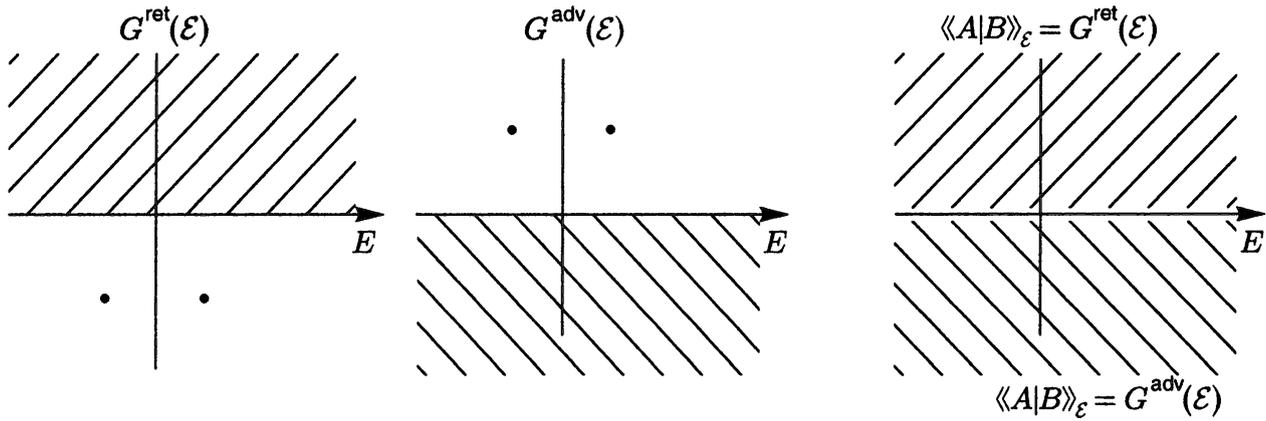


Рис. 11. Схематическое изображение аналитических свойств функций Грина на комплексной плоскости энергии. Заштрихованные области исключают наличие в них особенностей этих функций

Таким образом, сама исходная в нашем изложении функция Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ оказывается как бы сложенной из двух «благополучных» (т.е. не содержащих аналитических особенностей) областей значений аналитических продолжений запаздывающей и опережающей функций Грина (рис. 11),

$$\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \begin{cases} G^{\text{ret}}(A, B; \mathcal{E}) & \text{в случае } \text{Im } \mathcal{E} > 0, \\ G^{\text{adv}}(A, B; \mathcal{E}) & \text{в случае } \text{Im } \mathcal{E} < 0. \end{cases}$$

д) Причинные функции Грина

Остановимся еще на одной конструкции для двухвременных функций Грина, обычно используемой в задачах квантовой теории поля, где в разложениях динамической теории возмущений фигурируют упорядоченные по временным аргументам произведения операторов.

Определим причинную функцию Грина как хронологизированное произведение операторов $A(t)$ и $B(t')$,

$$\begin{aligned} G^c(A, B; t - t') &= -\frac{i}{\hbar} \langle T(A(t)B(t')) \rangle = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left(\Theta(t - t') \langle A(t)B(t') \rangle + \eta \Theta(t' - t) \langle B(t')A(t) \rangle \right). \end{aligned}$$

Не возводя проблему доопределения T -произведения в случае $t = t'$ в ранг принципиального вопроса, будем полагать, что

$$G^c(A, B; t - t') = \lim_{\tau \rightarrow 0, \tau > 0} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \langle T(A(t)B(t' + \tau)) \rangle,$$

так что в точке $t = t'$ введенная причинная функция Грина определяет те средние значения, которые соответствуют рассмотренным в гл. 1, § 4 статистическим корреляционным операторам:

$$G^c(A, B; 0) = -\eta \frac{i}{\hbar} \langle BA \rangle$$

(возможны, конечно, и другие способы доопределения T -произведения, каждый из которых необходимо будет сопоставлять с потребностями задач статистической теории). Так как введенная конструкция для $G^c(A, B; t)$ представляет собой как бы

гибрид запаздывающей и опережающей функций Грина, то, не повторяя во всех подробностях выкладки, связанной с переходом к энергетическому представлению каждого из слагаемых в $G^c(A, B; t)$, имеем

$$G^c(A, B; E) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} \langle A(t)B \rangle - \frac{i}{\hbar} \eta \int_{-\infty}^0 dt e^{\frac{i}{\hbar}(E-i\varepsilon)t} \langle BA(t) \rangle,$$

откуда, воспользовавшись спектральным разложением для корреляционных функций

$$\langle A(t)B \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(B, A; \omega) e^{\omega/\theta} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t}, \quad \langle BA(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(B, A; \omega) e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t},$$

получаем спектральное представление для причинной функции Грина, выраженное с помощью базовой спектральной плотности $J(B, A; \omega)$,

$$G^c(A, B; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(B, A; \omega) \left(\frac{e^{\omega/\theta}}{E - \omega + i\varepsilon} - \frac{\eta}{E - \omega - i\varepsilon} \right).$$

Отсюда, во-первых, следует принятое нами доопределение T -произведения в случае $t = 0$: так как

$$\begin{aligned} G^c(A, B; -\tau)_{\tau \rightarrow 0, \tau > 0} &= \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{\frac{i}{\hbar}E\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(B, A; \omega) \left(e^{\omega/\theta} \frac{1}{E - \omega + i\varepsilon} - \eta \frac{1}{E - \omega - i\varepsilon} \right)_{\tau \rightarrow 0}, \end{aligned}$$

то замыкание при $\tau > 0$ контура интегрирования по переменной E полуокружностью сверху исключает вклад от первого слагаемого, полюс которого расположен в нижней полуплоскости энергии, и

$$G^c(A, B; -\tau)_{\tau \rightarrow 0} = -\eta \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{\frac{i}{\hbar}(\omega+i\varepsilon)\tau} J(B, A; \omega)_{\tau \rightarrow 0} = -\eta \frac{i}{\hbar} \langle BA \rangle.$$

Во-вторых, учитывая очевидные соотношения

$$P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(B, A; \omega)}{E - \omega} = \text{Re } G^{\text{ret}}(E) = \text{Re } G^{\text{adv}}(E) = \text{Re } G^c(E),$$

а также

$$G^{\text{adv}}(E) = \text{Re } G(E) \mp i\pi J(E)(e^{E/\theta} - \eta),$$

имеем,

$$\text{Re } G = \frac{1}{2} (G^{\text{ret}}(E) + G^{\text{adv}}(E)); \quad -i\pi J(E) = \frac{1}{2} \frac{G^{\text{ret}}(E) - G^{\text{adv}}(E)}{e^{E/\theta} - \eta}.$$

Поэтому для причинной функции действительного аргумента E

$$G^c(E) = \text{Re } G - i\pi J(E)(e^{E/\theta} + \eta)$$

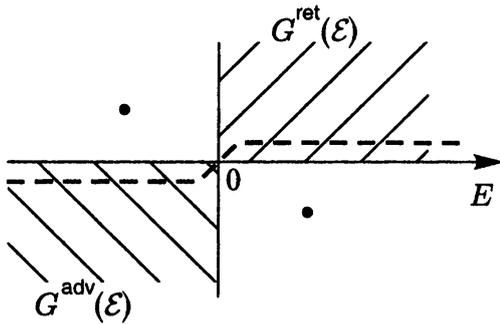


Рис. 12. Характер расположения особенностей аналитического продолжения причинной функции Грина $G^c(\mathcal{E})$ на комплексной плоскости энергии \mathcal{E} в случае $\theta = 0$. Пунктиром обозначены граничные значения функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, которые определяют значения $G^c(E)$ вдоль действительной оси E

сразу получаем ее связь с запаздывающей и опережающей функциями Грина

$$G^c(A, B; E) = \frac{e^{E/\theta} G^{\text{ret}}(A, B; E) - \eta G^{\text{adv}}(A, B; E)}{e^{E/\theta} - \eta}.$$

Так как свойства аналитических продолжений на комплексную плоскость энергии \mathcal{E} функций $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$ и $G^{\text{adv}}(\mathcal{E})$ нам хорошо известны (рис. 11), то поведение причинных функций $G^c(\mathcal{E})$ на \mathcal{E} -плоскости характеризуется наличием полюсов как в нижней (от $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$), так и в верхней (от $G^{\text{adv}}(\mathcal{E})$) полуплоскостях энергии, что может доставить массу ненужных хлопот (поэтому в температурно-временной теории эти функции Грина не популярны). Исключение составляет безтемпературный случай $\theta = 0$ (т. е. именно

тот случай, который рассматривается в квантовой механике и теории поля), когда среднее $\langle \dots \rangle$ исчисляется по основному состоянию системы $\langle 0 | \dots | 0 \rangle$ и когда

$$G^c(A, B; E) = \begin{cases} G^{\text{ret}}(A, B; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{I(B, A; \omega)}{E - \omega + i\epsilon} & \text{в случае } E > 0, \\ G^{\text{adv}}(A, B; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{I(B, A; \omega)}{E - \omega - i\epsilon} & \text{в случае } E < 0 \end{cases}$$

(рис. 12), где спектральная плотность $I(B, A; \omega)$ распадается соответственно на положительно- и отрицательно-частотные части, связанные непосредственно со спектральной плотностью $J(B, A; \omega)$,

$$I(B, A; \omega) = \begin{cases} e^{\omega/\theta} J(B, A; \omega) = J(A, B; -\omega)|_{\theta \rightarrow 0} & \text{в случае } \omega > 0 \\ -\eta J(B, A; \omega)|_{\theta \rightarrow 0} & \text{в случае } \omega < 0 \end{cases} = \\ = \sum_n \langle 0|A|n \rangle \langle n|B|0 \rangle \delta(\epsilon_n - \epsilon_0 - \omega) - \eta \sum_n \langle 0|B|n \rangle \langle n|A|0 \rangle \delta(\epsilon_n - \epsilon_0 + \omega).$$

е) Характерный пример — однополюсная функция Грина

Чтобы проиллюстрировать полученные выше выражения, рассмотрим упрощенный пример аналитической структуры запаздывающей функции Грина, характеризующейся только одним простым полюсом в нижней полуплоскости энергии,

$$G^{\text{ret}}(A, A^+; \mathcal{E}) = \frac{1}{\mathcal{E} - \Omega + i\Gamma}$$

(более сложную конструкцию для G^{ret} можно представить как сумму однополюсных, снабженных соответствующими не единичными коэффициентами). Этой функции

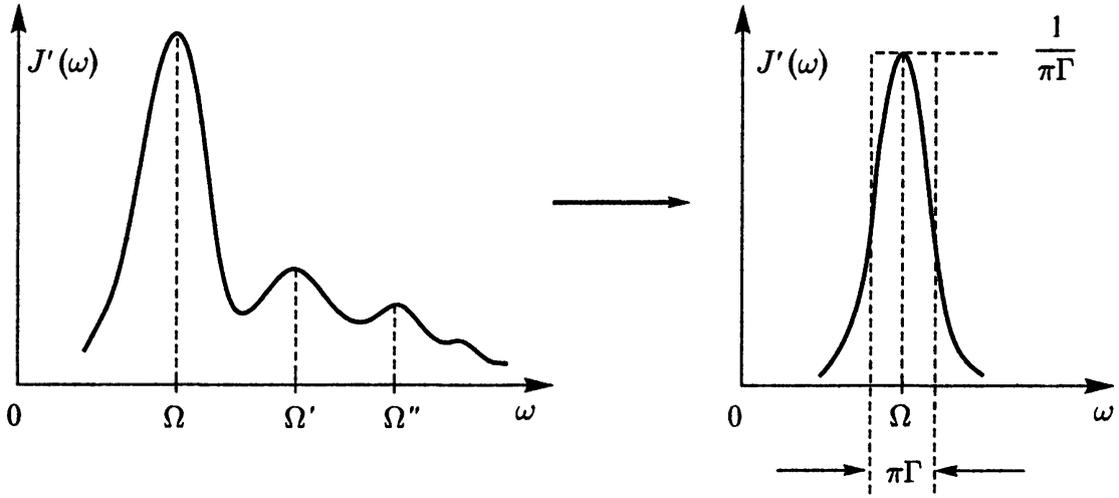


Рис. 13. Выделение отдельного резонанса в спектральной плотности $J'(\omega)$, соответствующего однополюсной структуре функции Грина $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$

Грина (или части более сложной многополюсной комбинации) соответствует спектральная плотность

$$\begin{aligned} J'(A^+, A; \omega) &= (e^{\omega/\theta} - \eta)J(A^+, A; \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^{\text{ret}}(A, A^+; \omega) = \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \Omega)^2 + \Gamma^2} = \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{1}{\omega - \Omega - i\Gamma} - \frac{1}{\omega - \Omega + i\Gamma} \right), \end{aligned}$$

представляющая классический резонанс релейской теории колебаний (рис. 13), в общем случае выделенный из многорезонансной зависимости спектральной плотности от частоты, ограничивающий над осью ω единичную площадь

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J'(A^+, A; \omega) = \frac{1}{\pi} \text{arctg} \frac{\omega}{\Gamma} \Big|_{\omega=-\infty}^{\omega=+\infty} = 1$$

и сжимающийся при $\Gamma \rightarrow 0$ в δ -функцию, соответствующую элементу линейчатого спектра.

Для соответствующих этой спектральной плотности $J'(A^+, A; \omega)$ функций Грина $G^{\text{adv}}(\mathcal{E})$ и $\langle\langle A^+ | A \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ непосредственно имеем

$$G^{\text{adv}}(A, A^+; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(A^+, A; \omega)}{E - \omega - i\epsilon} = \frac{1}{E - \Omega - i\Gamma} \mapsto G^{\text{adv}}(A, A^+; \mathcal{E}) = \frac{1}{\mathcal{E} - \Omega - i\Gamma},$$

$$\langle\langle A^+ | A \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \begin{cases} \frac{1}{\mathcal{E} - \Omega + i\Gamma} & \text{в случае } \text{Im } \mathcal{E} > 0, \\ \frac{1}{\mathcal{E} - \Omega - i\Gamma} & \text{в случае } \text{Im } \mathcal{E} < 0. \end{cases}$$

Зависимость функций Грина от времени, связанная с наличием у них единичного полюса на \mathcal{E} -плоскости, как это заранее очевидно, имеет характер затухающих

собственных колебаний с частотой Ω и временем жизни $t = \hbar/\Gamma$,

$$G_{\text{adv}}^{\text{ret}}(A, A^+; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{E - \Omega \pm i\Gamma} = \mp \frac{i}{\hbar} \Theta(\pm t) e^{\frac{i}{\hbar}\Omega t - \frac{\Gamma}{\hbar}|t|}.$$

Причинная функция Грина (ради пополнения коллекции) в E -представлении в рассматриваемом случае имеет вид

$$G^c(A, A^+; E) = \frac{E - \Omega - i\Gamma(e^{E/\theta} + \eta)/(e^{E/\theta} - \eta)}{(E - \Omega + i\Gamma)(E - \Omega - i\Gamma)},$$

что полностью соответствует сказанному нами ранее в отношении аналитической структуры этой функции на плоскости энергии, причем в случае $\theta \rightarrow 0$, когда

$$\left. \frac{(e^{E/\theta} + \eta)}{(e^{E/\theta} - \eta)} \right|_{\theta \rightarrow 0} \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{в случае } E > 0, \\ -1 & \text{в случае } E < 0, \end{cases}$$

она автоматически превращается по разные стороны от оси $\text{Re } \mathcal{E} = 0$ в соответствующие однополюсные структуры для $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$ и $G^{\text{adv}}(\mathcal{E})$, как это изображено на рис. 12.

В отношении среднего значения $\langle A^+ A \rangle$, продуцируемого однополюсной структурой $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$,

$$\langle A^+ A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J'(A^+, A; \omega)}{e^{\omega/\theta} - \eta} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{e^{\omega/\theta} - \eta} \frac{\Gamma/\pi}{(\omega - \Omega)^2 + \Gamma^2} d\omega,$$

сказать что-либо определенное трудно, но не вследствие того, что представленный интеграл не берется, а потому что для определения характерных термодинамических свойств системы даже в простейших случаях однополюсной аппроксимации функции Грина недостаточно. Но все же в случае $\theta \rightarrow 0$ имеем без изощрений

$$\langle A^+ A \rangle = -\eta \int_{-\infty}^0 \frac{\Gamma/\pi}{(\omega - \Omega)^2 + \Gamma^2} d\omega = -\eta \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \text{arctg} \frac{\Omega}{\Gamma} \right) = -\eta f(\Omega),$$

где функция $f(\Omega)$, представленная на рис. 14, имеет существенно различное поведение в области $\Omega \rightarrow 0$ в зависимости от того, как ведет себя в этой области

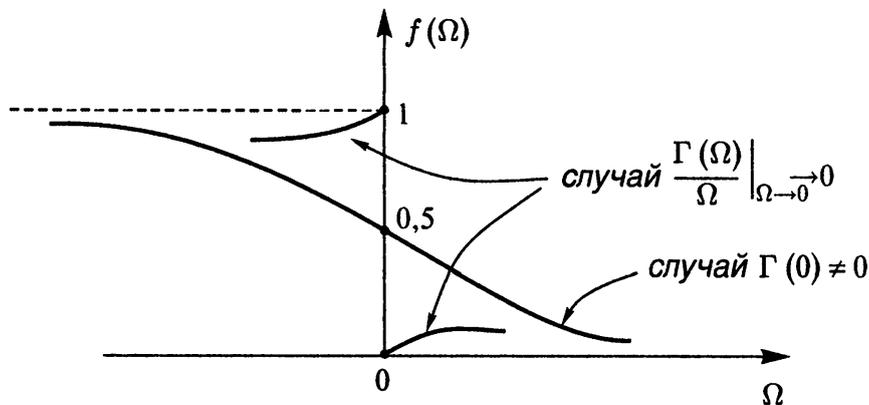


Рис. 14. Поведение среднего значения $\langle A^+ A \rangle$ в зависимости от частоты Ω , являющейся действительной координатой полюса функции Грина $G^{\text{ret}}(A, A^+; \mathcal{E})$

в дальнейшем выявить и описать его особенности, и, во-вторых, эта модельная система в формальном отношении должна быть достаточно простой, допускающей последовательное приближенное, а в некоторых случаях даже точное проведение всех основных статистических расчетов.

Таким образом, начальный момент исследований, являясь постановочным, оказывается чрезвычайно важным, так как, по существу, заранее обеспечивает небесперспективность дальнейшей работы по преодолению уже расчетных проблем. Примеров подобного подхода к началу статистических исследований можно привести множество: на модельных гамильтонианах строится теория проводимости и сверхпроводимости электронного газа в металлах, теория неидеального бозе-газа, откровенно модельными системами (так обожаемыми математиками вследствие их формальной простоты) являются обладающие свойствами упорядочения модели дискретных систем типа Гейзенберга и Изинга и т. д.

Конечно, в модельной постановке есть известная доля лукавства — выбираемая модель уже заранее должна обладать тем свойством, которое исследователь собирается теоретическими средствами в ней обнаружить, так что для выбора (или конструирования) той или иной микроскопической модели, нацеленной на выявление какого-либо интересного макроскопического эффекта, необходима либо достаточно высокая интуиция, либо (в ее отсутствии) ссылки на авторитетные источники.

β) Составление уравнений для функций Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_\varepsilon$

С практической точки зрения — это не сложная задача: нужно только рассчитать коммутатор $[A, \mathcal{H}]_-$. Поэтому основным моментом этого этапа исследований является целесообразный выбор самих операторов A и B . Свойства исследуемой системы от этого выбора, конечно, не зависят, но его удачный вариант в значительной мере влияет на структуру образующейся цепочки уравнений и интерпретацию проводимой в дальнейшем процедуры ее расщепления.

В этом отношении приходится руководствоваться не только структурой необходимых для приложений средних $\langle BA \rangle$ и $\langle BA(t) \rangle$ (т. е. структурой спектральной плотности $J(B, A; \omega)$), но и удачно предугаданным характером резонансных свойств рассматриваемой системы.

γ) Решение уравнений для функций Грина

Преобразование цепочки уравнений в замкнутую систему конечного числа уравнений — это в общем случае (исключая редкие случаи точно решаемых статистических задач) сложная аппроксимационная процедура, реализация которой не укладывается в какую-либо систему стандартных рецептов. Конечно, если, как мы уже отмечали ранее,

$$\langle\langle [A, \mathcal{H}]_- | B \rangle\rangle_\varepsilon = \varepsilon_A \langle\langle A | B \rangle\rangle_\varepsilon + g \langle\langle A' | B \rangle\rangle_\varepsilon$$

и параметр $g \ll 1$, то возникает возможность построения последовательных приближений по степеням малого параметра g , однако подобная ситуация, примером которой может служить построение вириального разложения в теории разрежения газов, — это редчайший случай: во всех представляющих интерес прикладных физических задачах такого малого параметра нет, и процедура расщепления остается одним из самых идеологически сложных и спорных вопросов во всей статистической теории неидеальных систем.

δ) Определение спектральной плотности $J(\omega)$

Это чисто технический вопрос, связанный с использованием математических (точных и приближенных) методов расчета интегралов, сумм и т. д.

затухание $\Gamma(\Omega)$: в случае $\Gamma(0) \neq 0$ функция $f(\Omega)$ непрерывна, и $f(0) = 1/2$; в случае же $\Gamma(\Omega)/\Omega \rightarrow 0$ при $\Omega \rightarrow 0$ (затухание исчезает быстрее, чем частота собственных колебаний, как это имеет место, например, для электронного газа вблизи границы Ферми, см. т. 2, гл. 2, § 2, п. в)) функция $f(\Omega)$ в точке $\Omega = 0$ претерпевает скачок, равный единице.

ж) Общая схема метода двухвременных температурных функций Грина

В статистической механике нет единого подхода к исследованию какой-либо физической проблемы и всегда существует выбор того или иного математического метода решения поставленной задачи. Эффективность этих методов, приводящих в конце концов разными путями к одним и тем же результатам (если исключить возможные и досадные попутные ошибки), можно оценить только в процессе самих исследований, сопоставляя объем и сложность проделанной работы. Напомним в качестве примера (см. т. 2, гл. 3), что в классической теории неидеальных газов термодинамический потенциал (или соответствующую статистическую сумму) можно рассчитывать, как говорится, в лоб, исходя из его определения, что в принципе возможно и даже дало начало методу Майера построения вириального разложения для термодинамических характеристик неидеального газа, а можно использовать для этой цели более эффективный метод Боголюбова, связанный с последовательным решением цепочки интегро-дифференциальных уравнений для двух-, трех- и т. д. частичных корреляционных функций.

Предложенный в этой главе метод двухвременных температурных функций Грина, естественно, нацелен на использование той же идеи, оперируя уже на общем квантовом уровне с одно-, двух- и т. д. частичными статистическими операторами в специфическом «гриновском» спектральном оформлении.

Представим в целом (и, естественно, в общих чертах) постановку возможных исследований этим методом конкретных физических проблем в виде последовательности (конечно, весьма условной) необходимых действий, требующих каждый раз внесения определенных аппроксимационных идей, которые подчас могут иметь и более общее и самостоятельное значение.

а) Задание системы

Желая исследовать или объяснить особенности какого-либо физического явления на основе теоретического подхода, мы полагаем, что микроскопическая структура рассматриваемой системы нам известна (т. е. на основе общих соображений мы можем судить о том, из каких частиц, атомов или молекул состоит система, какие силы взаимодействия существуют между ними и внутри них и т. д.). Однако такая полная и возможная только в принципе информация о микроскопическом устройстве реально существующей физической системы превращает задачу ее исследования методами статистической механики в абсолютно нерешаемую проблему.

Чтобы добиться в этом направлении какого-либо успеха, приходится выделять в рассматриваемой системе специфические микроскопические особенности, которые определяют основной характер того явления (или той особенности системы), на объяснение которого направлено все теоретическое исследование.

На практике это означает, что вместо реалистического гамильтониана, отражающего все перечисленные выше плюс еще многие неназванные особенности микроскопического устройства системы, предлагается модельная система (т. е. модельный гамильтониан), которая должна удовлетворять по крайней мере двум условиям. Во-первых, она должна обладать тем свойством, которое мы собственно и намереваемся

е) Использование полученного результата для спектральной плотности $J(B, A; \omega)$

Рационально построенная спектральная плотность $J(B, A; \omega)$ связана с рядом физических характеристик системы, которые сопоставляются с наблюдаемыми величинами и расчет которых представляет в ряде случаев определенную математическую проблему. Ряд формул, связывающих спектральную плотность с основными макроскопическими характеристиками статистических систем, мы получим в следующих параграфах.

з) Идеальный ферми-газ как пример реализации общей программы исследований

Прежде всего, идеальный ферми-газ — это не формальная, а физическая система, достаточно убедительно моделирующая, как это показано в т. 2, гл. 2, § 2, п. в), вырожденный несверхпроводящий электронный газ в металлах. Гамильтониан этой системы имеет вид диагональной квадратичной формы по полевым операторам (см. гл. 1, § 3)

$$\mathcal{H} = H - \mu N = \sum_p \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right) a_p^+ a_p = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p,$$

$$[a_p^+, a_{p'}]_+ = \Delta(p - p'); \quad [a_p^+, a_{p'}^+]_+ = [a_{p'}, a_p]_+ = 0.$$

Полагая $A = a_p$, $B = a_{p'}^+$ (иного выбора практически больше нет), имеем

$$[A, \mathcal{H}]_- = \varepsilon_p (a_p a_p^+ a_p - a_p^+ a_p a_p) = \varepsilon_p a_p,$$

и уравнение для функции Грина $\langle\langle a_p | a_{p'}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ оказывается сразу замкнутым,

$$\mathcal{E} \langle\langle a_p | a_{p'}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \langle a_p a_{p'}^+ - \eta a_{p'}^+ a_p \rangle + \varepsilon_p \langle\langle a_p | a_{p'}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}.$$

Ввиду того что $\varepsilon_p \neq \mathcal{E}$ (так как \mathcal{E} — комплексная величина с отличной от нуля мнимой частью, а ε_p — действительная), то в случае $p' \neq p$ сразу имеем, что $\langle\langle a_p | a_{p'}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = 0$.

Выбирая целесообразным образом параметр $\eta = -1$, сразу получаем ответ для функции Грина антикоммутиационного типа

$$\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_p},$$

из которого для спектральной плотности $J_p(\omega) = J(a_p^+, a_p; \omega)$ следует выраженная с помощью δ -функции характерная для идеальных систем зависимость от частоты, свидетельствующая об отсутствии в системе затухания,

$$J_p(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega - \varepsilon_p + i\varepsilon} \cdot \frac{1}{e^{\omega/\theta} + 1} = \frac{1}{e^{\varepsilon_p/\theta} + 1} \delta(\omega - \varepsilon_p).$$

Эта спектральная плотность определяет средние числа заполнения в идеальной ферми-системе

$$n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J_p(\omega) d\omega = \frac{1}{e^{\varepsilon_p/\theta} + 1},$$

а через них стандартными методами внутреннюю энергию, химический потенциал и все остальное с помощью соотношений (см. т. 2, гл. 2, § 2)

$$\mathcal{E} = \langle H \rangle = \sum_p \frac{p^2}{2m} n_p; \quad N = \sum_p n_p; \quad \Omega = -pV = -\frac{2}{3}\mathcal{E}; \quad C_{VN} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta}.$$

Может показаться, что появление фермиевской структуры для n_p связано с выбором параметра $\eta = -1$. Чтобы разубедиться в этом, сделаем альтернативный выбор $\eta = +1$. Тогда для функции Грина уже коммутационного типа получим уравнение

$$\mathcal{E} \langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = 1 - 2 \langle a_p^+ a_p \rangle + \varepsilon_p \langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}},$$

из которого следует решение, отличающееся от полученного выше,

$$\langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \frac{1 - 2n_p}{\mathcal{E} - \varepsilon_p}; \quad J_p(\omega) = \frac{1 - 2n_p}{e^{\varepsilon_p/\theta} - 1} \delta(\omega - \varepsilon_p),$$

но которое, конечно же, приводит к тому же выражению для ферми-распределения, что и антикоммутационный вариант решения задачи,

$$n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J_p(\omega) d\omega = \frac{1 - 2n_p}{e^{\varepsilon_p/\theta} - 1} \mapsto n_p = \frac{1}{e^{\varepsilon_p/\theta} + 1},$$

но, как легко убедиться, менее естественным путем.

Функции Грина и физические характеристики статистических систем

Прежде чем перейти к рассмотрению вопроса о том, какие именно функции Грина или определяющие их спектральные плотности должны фигурировать в формулах, выражающих их связь с интересующими нас конкретными физическими характеристиками системы, необходимо договориться, для каких систем эти связи будут устанавливаться. Не претендуя на энциклопедическую всеобщность, в этой главе в качестве показательного примера мы ограничимся в основном рассмотрением однокомпонентной нерелятивистской системы частиц с парным центральным их взаимодействием друг с другом, гамильтониан которой

$$H = \sum_{1 \leq i \leq N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

согласно гл. 1, § 3 в представлении вторичного квантования имеет вид

$$\begin{aligned} H &= \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_q \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p = \\ &= \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) + \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} \nu(q) \rho_q \rho_{-q} - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q), \end{aligned}$$

где $E_p = p^2/(2m)$, а $\nu(q)$ и ρ_q — фурье-образы потенциала взаимодействия частиц друг с другом $\Phi(R)$ и оператора плотности числа частиц (в координатном и вторично квантованном представлении) соответственно:

$$\begin{aligned} \nu(q) &= \int \Phi(R) e^{\frac{i}{\hbar} qR} d\mathbf{R}, \\ \rho_q &= \int \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) e^{\frac{i}{\hbar} q\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{1 \leq i \leq N} e^{\frac{i}{\hbar} q\mathbf{r}_i}, \\ \rho_q &= \sum_p a_{p+q}^+ a_p, \quad \rho_q^+ = \rho_{-q}, \quad \rho_0 = \sum_p a_p^+ a_p = N. \end{aligned}$$

Эта система, являясь, по существу, модельной, конечно, не охватывает всех особенностей реально существующих неидеальных квантовых систем. Однако в теоретических разработках разных уровней она является одной из основных и достаточно сложных систем даже после принятия дополнительных, также модельных, упрощающих ее предположений.

§ 1. Равновесные характеристики статистической системы

Как указывалось ранее, равновесные свойства системы определяются «двух-временными» величинами в пределе $t \rightarrow 0$. Если бы нас интересовали только равновесные системы, то спектральную технику можно было бы и не вводить, так что полученные в данном параграфе формулы можно рассматривать как «побочный» продукт двухвременного формализма.

а) Корреляционные функции равновесной системы

В соответствии с гл. 1, § 4 импульсное представление s -частичного статистического оператора определяется как рассчитываемое с помощью полного статистического оператора $\rho(1, \dots, N)$ среднее от соответствующего произведения операторов рождения и уничтожения в импульсном представлении вторичного квантования

$$\langle p'_1, \dots, p'_s | F_s | p_1, \dots, p_s \rangle = v^s \langle a_{p_1}^+ \dots a_{p_s}^+ a_{p'_1} \dots a_{p'_s} \rangle.$$

Полагая эту формулу исходной, можно ввести по мере надобности и иные представления этого оператора (и вообще корреляционных средних типа $\langle BA \rangle = \langle a_{p_1}^+ \dots a_{p'_1} \rangle$), прибегая к помощи соответствующих стандартных операторов преобразования.

Оставляя для любителей рассмотрение случаев произвольных значений величины s , отметим, что одной из основных корреляционных величин, изучаемой в статистической физике и фигурирующей во многих ее соотношениях, является парная (или двухчастичная) корреляционная функция $F_2(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) = F_2(R)$, физический смысл которой, конечно, заимствуется из классической статистической теории (см. т. 2, гл. 3, § 1). Зависящая от координат двух частиц системы и определяющая средние значения величин двухчастичного динамического типа

$$\langle \mathfrak{B} \rangle = \left\langle \sum_{1 \leq i < j \leq N} B(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right\rangle = \frac{1}{2v^2} \iint_{(V)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

эта функция вследствие того, что «оператор» $B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ является диагональным именно в координатном представлении,

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | B(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

и

$$\begin{aligned} \langle \mathfrak{B} \rangle &= \text{Sp} \{ \mathfrak{B} \rho \} = \frac{N(N-1)}{2V} \text{Sp}_{(1,2)} \{ B(1, 2) F_2(1, 2) \} = \\ &= \frac{1}{2v^2} \text{Sp} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | B(1, 2) | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 \rangle \langle \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 | F_2(1, 2) | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \\ &= \frac{1}{2v^2} \iint_{(V)} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle, \end{aligned}$$

определяется диагональной частью координатного представления двухчастичного статистического оператора

$$F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle.$$

В случае, когда $B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = B(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$, как это имеет место для потенциала взаимодействия частиц друг с другом, $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)$, эта функция зависит только от одного аргумента — модуля расстояния между частицами $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| = R$,

$$F_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F_2(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) = F_2(R)$$

и подчинена вытекающему из общих физических требований к корреляционным функциям условию ослабления корреляций

$$\lim F_2(R)|_{R \rightarrow \infty} = 1,$$

играющему роль своеобразного для этой функции граничного условия.

Переход от исходного для оператора F_2 импульсного представления к координатному представлению совершается с помощью оператора преобразования (см. гл. 1, § 2)

$$\langle \mathbf{r} | U | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \mathbf{p} \mathbf{r}}.$$

Его четырехкратное использование по отношению к каждому импульсному аргументу дает в случае $\mathbf{r}'_1 = \mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}'_2 = \mathbf{r}_2$

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \mathbf{p}'_1 \mathbf{p}'_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1) \mathbf{r}_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'_2 - \mathbf{p}_2) \mathbf{r}_2} v^2 \langle a_{\mathbf{p}_1}^+ a_{\mathbf{p}_2}^+ a_{\mathbf{p}'_1} a_{\mathbf{p}'_2} \rangle.$$

Так как операция взятия среднего по гиббсовскому распределению осуществляется с помощью оператора $e^{-H/\theta}$, а гамильтониан H в каждом своем слагаемом сохраняет импульс, то среднее от четверки полевых операторов будет отличным от нуля только в случае $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_1 + \mathbf{p}'_2$. Поэтому, обозначая $\mathbf{p}'_1 - \mathbf{p}_1 = \mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}'_2$ и $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{R}$, получаем для парной корреляционной функции выражения в двух рабочих вариантах:

$$F_2(R) = v \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{R}} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p} \mathbf{p}' } \langle a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}} \rangle = v \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{R}} \left(\frac{\langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^+ \rangle}{N} - 1 \right),$$

где при переходе от первой формулы ко второй мы учли, что $[\rho_{\mathbf{x}}, a_{\mathbf{k}}]_- = a_{\mathbf{k}-\mathbf{x}}$ и $\sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = N$.

Прежде чем проанализировать полученный для $F_2(R)$ результат, заметим, что эти же соотношения можно было получить и с помощью теоремы о вариации свободной энергии \mathcal{F} (см. гл. 1, § 4): так как

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \Phi(R)} = \frac{-\theta \text{Sp} \left\{ e^{-(\mathcal{H}_0 + H_1)/\theta} \left(-\frac{1}{\theta} \frac{\delta H_1}{\delta \Phi(R)} \right) \right\}}{\text{Sp} \left\{ e^{-(\mathcal{H}_0 + H_1)/\theta} \right\}} = \left\langle \frac{\delta H_1}{\delta \Phi(R)} \right\rangle,$$

то, подставляя в оба варианта для оператора H_1 интегральное представление величины $\nu(\mathbf{q})$ через $\Phi(R)$, варьируя по $\Phi(R)$ (что снимает интеграл по $d\mathbf{R}$) и умножая на $2v^2/V$, мы сразу получаем оба приведенных выше варианта формул для парной корреляционной функции $F_2(R)$.

Заметим теперь, что в сумме по $\mathbf{q} = (\mathbf{q})$ не все слагаемые имеют одинаковый статистический порядок по N , именно, слагаемое с $\mathbf{q} = 0$ оказывается в этом отношении выделенным,

$$\frac{\langle \rho_0 \rho_0^+ \rangle}{N} - 1 = \frac{1}{N} \left(\sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}'}^+ a_{\mathbf{p}'} \right) - 1 = N - 1 \cong N^1,$$

в то время как другие слагаемые с $q \neq 0$

$$\left. \frac{\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle}{N} - 1 \right|_{q \neq 0} \sim N^0 = 1,$$

и ситуация в математическом отношении оказывается эквивалентной той, которая имела место при рассмотрении идеального бозе-газа в связи с его конденсацией (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. г)). Выделяя слагаемое с $q = 0$ до перехода от суммы по q к трехмерному интегралу по dq и перенося его в левую часть равенства, получим

$$F_2(R) - 1 = v \frac{1}{V} \sum_{q \neq 0} e^{i q R} \left(\frac{\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle}{N} - 1 \right) = v \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i q R} \left(\frac{\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle}{N} - 1 \right) dq.$$

Таким образом, мы связали парную корреляционную функцию $F_2(R)$ со средним значением $\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle = \langle \rho_q^+ \rho_q \rangle$ с помощью фурье-преобразования

$$(F_2(R) - 1) \xleftrightarrow{F} v \left(\frac{\langle \rho_q^+ \rho_q \rangle}{N} - 1 \right),$$

определив тем самым целесообразность рассмотрения функции Грина типа плотность-плотность и соответствующей ей спектральной плотности

$$\langle \rho_q^+ \rho_q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\rho_q^+, \rho_q; \omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} - 1} \text{Im} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon},$$

которое, как мы увидим далее, определяет не только функцию $F_2(R)$, но и многие другие характеристики системы.

б) Внутренняя энергия системы

Как показывает опыт теоретического рассмотрения идеальных квантовых систем, использование большого канонического распределения в этих исследованиях оказывается наиболее рациональным. Сохраняя эту традицию усреднения по большому каноническому распределению по отношению к неидеальным системам, мы будем рассматривать не внутреннюю энергию системы $\mathcal{E} = \langle H \rangle = \langle H_0 \rangle + \langle H_1 \rangle$, а ее квазивнутреннюю энергию

$$\tilde{\mathcal{E}} = \theta^2 \frac{\partial \ln \zeta}{\partial \theta} = \frac{\text{Sp} \{ \mathcal{H} e^{-\mathcal{H}/\theta} \}}{\text{Sp} e^{-\mathcal{H}/\theta}} = \langle \mathcal{H}_0 + H_1 \rangle = \langle H_0 + H_1 - \mu N \rangle,$$

значение которой при необходимости можно пересчитать к величине $\mathcal{E} = \tilde{\mathcal{E}} + \mu N$ уже на чисто термодинамическом уровне.

Из написанного выражения следует, что для прямого расчета величины $\tilde{\mathcal{E}}$ необходимо располагать двумя функциями Грина: для определения среднего от аддитивной части гамильтониана \mathcal{H}_0 — функцией $\langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$, для определения $\langle H_1 \rangle$ — двухчастичной функцией Грина или функцией $\langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$ типа плотность-плотность, что, конечно, создает дополнительные трудности. Однако существуют формулы, свободные от этого недостатка, на одной из которых мы остановимся подробнее.

Если вспомнить уравнение движения для оператора $a_p(t)$ (см. гл. 1, § 3, п. л))

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} a_p(t) &= [a_p(t), \mathcal{H}]_- = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} [a_p, \mathcal{H}] e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} = \\ &= \varepsilon_p a_p(t) + \frac{1}{V} \sum_q \nu(q) \sum_{p'} a_{p'-q}^+(t) a_{p'}(t) a_{p-q}(t), \end{aligned}$$

умножить его слева почленно на $a_p^+/2 = a_p^+(0)/2$, просуммировать по p и взять среднее $\langle \dots \rangle$, то, с учетом предельного соотношения

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_{pp'} \langle a_p^+(0) a_{p'-q}^+(t) a_{p'}(t) a_{p-q}(t) \rangle = \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_{pp'} \langle a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p \rangle = \langle H_1 \rangle$$

(в первой сумме произведена замена индекса суммирования $p - q \rightarrow p$, $p \rightarrow p + q$), получим выражение для средней величины энергии взаимодействия частиц друг с другом через одночастичную корреляционную функцию $\langle a_p^+(0) a_p(t) \rangle$,

$$\langle H_1 \rangle = \frac{1}{2} \sum_p \left(-\varepsilon_p \langle a_p^+(0) a_p(t) \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \langle a_p^+(0) a_p(t) \rangle \right) \Big|_{t \rightarrow 0},$$

откуда для энергии $\tilde{\mathcal{E}}$ следует формула

$$\tilde{\mathcal{E}} = \langle \mathcal{H}_0 + H_1 \rangle = \frac{1}{2} \sum_p \left(\varepsilon_p - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) \langle a_p^+(0) a_p(t) \rangle \Big|_{t \rightarrow 0},$$

которую, используя спектральное разложение для корреляционной функции

$$\langle a_p^+ a_p(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \omega t} J_p(\omega) d\omega,$$

можно представить в окончательном виде

$$\tilde{\mathcal{E}} = \frac{1}{2} \sum_p \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (\varepsilon_p + \omega) J_p(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \text{Im} \sum_p \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\varepsilon_p + \omega}{e^{\omega/\theta} - \eta} \langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon}.$$

Если, откровенно заимствуя из квантовой теории поля структуру одночастичной функции Грина, представить ее в форме

$$\langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\varepsilon} = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_p - \mathfrak{M}_p(\mathcal{E})},$$

определив тем самым как бы «массовый оператор» $\mathfrak{M}_p(\mathcal{E})$ (при этом не связывая его с какой-либо аппроксимацией или конкретным частичным суммированием ряда теории возмущений), то, выделяя в нем действительную и мнимую части для значений \mathcal{E} вблизи действительной оси энергии,

$$\mathfrak{M}_p(E \pm i\varepsilon) = M_p(E) \mp i\Gamma_p(E)$$

(так как аналитические свойства запаздывающей и опережающей функций Грина у нас определены, то фигурирующая в этом выражении величина $\Gamma_p(E) > 0$),

получаем

$$-\frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon} = \frac{1}{2} \frac{\frac{1}{\pi} \Gamma(\omega)}{[\omega - \epsilon_p - M_p(\omega)]^2 + \Gamma_p^2(\omega)},$$

т. е. внутренняя энергия $\tilde{\mathcal{E}}$ определяется как сумма вкладов от резонансов «однополюсных» функций Грина, предварительно рассмотренных нами в качестве модельного показательного примера в гл. 2, § 2, п. е).

в) Термодинамический потенциал Ω

Введем вместо гамильтониана $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + H_1$, характеризующего рассматриваемую систему, фиктивный гамильтониан $\mathcal{H}_\lambda = \mathcal{H}_0 + \lambda H_1$, где λ — параметр «недовключения» взаимодействия частиц системы друг с другом — может изменяться в пределах $0 \leq \lambda \leq 1$. Определяя потенциал Ω_λ для системы с недовключенным взаимодействием H_1 стандартным образом как

$$\Omega_\lambda = -\theta \ln \operatorname{Sp} e^{-\mathcal{H}_\lambda/\theta},$$

согласно гл. 1, § 4, п. д), имеем

$$\frac{\partial \Omega_\lambda}{\partial \lambda} = \langle H \rangle^{(\lambda)}, \quad \Omega - \Omega_0 = \Delta \Omega = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda H_1 \rangle^{(\lambda)},$$

где среднее значение $\langle \dots \rangle^{(\lambda)}$ определяется с помощью статистического оператора

$$\rho_\lambda = \frac{e^{-\mathcal{H}_\lambda/\theta}}{\operatorname{Sp} e^{-\mathcal{H}_\lambda/\theta}}$$

и где Ω_0 — известный из теории идеальных систем ($\lambda = 0$) потенциал Гиббса (см. т. 2, гл. 2).

Замечая, что величина $\langle \lambda H_1 \rangle^{(\lambda)}$ отличается от рассмотренной ранее величины $\langle H_1 \rangle$ только тем, что в ней вместо $\nu(q)$ везде стоит $\lambda \nu(q)$, получаем, используя результат пункта б) этого параграфа, выражения для $\Delta \Omega$ через функцию Грина типа плотность-плотность:

$$\Delta \Omega = \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q) - \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} - \eta} \int_0^1 d\lambda \operatorname{Im} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon}^{(\lambda)},$$

а также через одночастичную функцию Грина $\langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_\epsilon$:

$$\begin{aligned} \Delta \Omega &= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (\epsilon_p - \omega) \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} J_p^{(\lambda)}(\omega) = \\ &= -\frac{1}{2\pi} \sum_p \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega (\epsilon_p - \omega) \frac{1}{e^{\omega/\theta} - \eta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \operatorname{Im} \langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon}^{(\lambda)}. \end{aligned}$$

Последнюю формулу можно видоизменить, введя вместо функции $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(\lambda)}$ соответствующий ей «массовый оператор» $\mathfrak{M}_p^{(\lambda)}(\mathcal{E})$. Замечая, что

$$\sum_p (\varepsilon_p - \omega) \operatorname{Im} \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_p - \mathfrak{M}_p(\mathcal{E})} \Big|_{\mathcal{E}=\omega+i\varepsilon} = - \sum_p \operatorname{Im} \left(1 + \frac{\mathfrak{M}_p(\mathcal{E})}{\mathcal{E} - \varepsilon_p - \mathfrak{M}_p(\mathcal{E})} \right)_{\mathcal{E}=\omega+i\varepsilon},$$

получаем

$$\Delta\Omega = \frac{1}{2\pi} \sum_p \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{e^{\omega/\theta} - \eta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \operatorname{Im} \frac{\mathfrak{M}_p^{(\lambda)}(\omega + i\varepsilon)}{\omega + i\varepsilon - \varepsilon_p - \mathfrak{M}_p^{(\lambda)}(\omega + i\varepsilon)}.$$

В связи с последней формулой интересно отметить, что самая грубая аппроксимация массового оператора (например, в первом порядке по $\nu(q)$) определяет величину $\Delta\Omega$ в виде уже просуммированной геометрической прогрессии по этому приближенному значению \mathfrak{M} ,

$$\Delta\Omega = \frac{1}{2\pi} \sum_p \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{e^{\omega/\theta} - \eta} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \operatorname{Im} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\mathfrak{M}_p^{(\lambda)}(\omega + i\varepsilon)}{\omega - \varepsilon_p + i\varepsilon} \right)^n,$$

что, несомненно, повышает авторитет и роль (или, как теперь говорят, рейтинг) массового оператора в аппроксимационной процедуре.

Располагая термодинамическим потенциалом Ω и внутренней энергией \mathcal{E} , с помощью простых термодинамических соотношений можно рассчитать все равновесные характеристики рассматриваемой системы, включая уравнения состояния, теплоемкости, энтропию и т. д.

Необходимо отметить в связи с этим, что вследствие использования оператора $\mathcal{H} = H - \mu N$ и большого канонического распределения полученные формулы определяют эти величины в переменных (θ, V, μ) , именно,

$$\Omega(\theta, V, \mu) = \Omega_0(\theta, V, \mu) + \Delta\Omega(\theta, V, \mu),$$

и пересчет к более удобным с точки зрения приложений переменным (θ, V, N) должен осуществляться с помощью обращения соотношения

$$N = - \frac{\partial \Omega(\theta, V, \mu)}{\partial \mu} = N(\theta, V, \mu)$$

относительно химического потенциала μ (в котором при желании можно будет затем выделить значение химического потенциала идеального газа μ_0 той же плотности N/V):

$$\mu = \mu(\theta, V, N) = \mu_0(\theta, V, N) + \Delta\mu(\theta, V, N),$$

с последующей подстановкой $\mu(\theta, V, N)$ в полученные результаты, например в свободную энергию системы

$$\mathcal{F}(\theta, V, N) = \Omega(\theta, V, \mu(\theta, V, N)) + \mu(\theta, V, N)N.$$

Заметим, наконец, что величина $\langle\langle \lambda H_1 \rangle\rangle^{(\lambda)}$ является макроскопической характеристикой равновесной системы, и ее значение не зависит от выбора термодинамических переменных (если, конечно, их варианты пересчитываются друг в друга с соблюдением всех правил термодинамики). Поэтому, если мы заинтересуемся тем изменением свободной энергии

$$\mathcal{F}(\theta, V, N) = -\theta \ln \operatorname{Sp} e^{-H/\theta},$$

которое связано с учетом взаимодействия частиц друг с другом H_1 ,

$$\Delta\mathcal{F}(\theta, V, N) = \mathcal{F}(\theta, V, N) - \mathcal{F}_0(\theta, V, N) = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda H_1 \rangle^{(\lambda)},$$

мы получим в точности те же выражения, что и для $\Delta\Omega$ с тем только отличием, что в формулах с использованием $\Delta\mathcal{F}(\theta, V, N)$ операция среднего $\langle \dots \rangle$ берется с помощью канонического распределения Гиббса

$$\rho(\theta, V, N) = \frac{e^{-H/\theta}}{\text{Sp } e^{-H/\theta}},$$

и получаемые результаты оказываются выраженными в переменных (θ, V, N) . Учитывая термодинамические правила пересчета от одних переменных к другим, получаем, таким образом, что

$$\Delta\Omega(\theta, V, \mu(\theta, V, N)) = \Delta\mathcal{F}(\theta, V, N) \quad \text{и} \quad \Delta\Omega(\theta, V, \mu) = \Delta\mathcal{F}(\theta, V, N(\theta, V, \mu)),$$

где $\mu(\theta, V, N)$ и $N(\theta, V, \mu)$ определяются в соответствии с написанными ранее соотношениями.

§ 2. Реакция системы на внешнее возмущение и ее резонансные свойства

Любая реально существующая физическая система постоянно находится под воздействием возмущений, создаваемых воздействием на нее не только внешних силовых полей, но и других находящихся с ней в контакте термодинамических систем, включая ограничивающие ее стенки (какими бы «идеальными» они ни были). По своему характеру эти возмущения можно разделить на хаотические, примером которых являются все в принципе неистребимые флуктуационные и шумовые воздействия на систему, присутствующие всегда и обеспечивающие устойчивые тепловые и иные контакты между равновесными термодинамическими системами, и регулярные, реакция на величину и характер которых нас собственно и будет в данном параграфе интересовать. Несмотря на то что в рамках линейной теории это внешнее воздействие приходится считать слабым, оно по воле экспериментатора регулируется по амплитуде и по частоте, выявляя при этом определенные макроскопически наблюдаемые особенности системы: реакция на интенсивность или амплитуду внешнего динамического воздействия определяет соответствующую восприимчивость системы, а частотные и иные временные вариации этого воздействия выявляют резонансные свойства и ее релаксационные особенности.

а) Временная теория возмущений

Основные идеи построения временной теории возмущений по отношению к волновым функциям были сформулированы еще основателями квантовой механики, и наша задача теперь состоит в том, чтобы переформулировать эту теорию применительно к статистическому оператору $\rho(t)$, характеризующему смешанное состояние статистической системы.

Положим, что система, характеризуемая гамильтонианом H , подверглась динамическому возмущению, определяемому оператором $\delta H(t)$, причем в соответствии

с принятой традицией будем полагать, что в удаленные в прошлое моменты времени этого возмущения не было и система находилась в равновесном состоянии, т. е.

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \delta H(t) = 0, \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} \rho(t) = \rho = \frac{e^{-H/\theta}}{\text{Sp } e^{-H/\theta}}.$$

Запишем уравнение движения для оператора $\rho(t) = \rho + \delta\rho(t)$, учитывая, что коммутатор $[H, \rho]_- = 0$,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho + \delta\rho(t)) &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \delta\rho(t) = [H + \delta H(t), \rho + \delta\rho(t)]_- = \\ &= [H, \delta\rho(t)]_- + [\delta H(t), \rho]_- + [\delta H(t), \delta\rho(t)]_- . \end{aligned}$$

Чтобы убрать первый из стоящих в правой части этого уравнения коммутатор, произведем замену

$$\delta\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} u(t) e^{\frac{i}{\hbar} Ht}, \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \delta\rho(t) = [H, \delta\rho(t)]_- + e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} u(t) \right) e^{\frac{i}{\hbar} Ht}.$$

Тогда, умножая почленно каждое из слагаемых образующегося уравнения относительно оператора $u(t)$ слева на $e^{\frac{i}{\hbar} Ht}$, а справа — на $e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}$, получаем уравнение движения статистической системы в виде

$$\begin{cases} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} u(t) = [e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \delta H(t) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}, \rho]_- + [e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \delta H(t) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}, u(t)]_-, \\ u(t)|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow 0. \end{cases}$$

Его эквивалентный интегральный вариант

$$u(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau [e^{\frac{i}{\hbar} H\tau} \delta H(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} H\tau}, \rho]_- - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau [e^{\frac{i}{\hbar} H\tau} \delta H(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} H\tau}, u(\tau)]_-$$

сразу позволяет воспользоваться итерационной процедурой, определяющей реакцию статистического оператора в первом, втором и т. д. порядках по гамильтониану возмущения δH ,

$$\begin{aligned} u(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau [e^{\frac{i}{\hbar} H\tau} \delta H(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar} H\tau}, \rho]_- + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t d\tau_1 \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 \times \\ &\quad \times [e^{\frac{i}{\hbar} H\tau_1} \delta H(\tau_1) e^{-\frac{i}{\hbar} H\tau_1}, [e^{\frac{i}{\hbar} H\tau_2} \delta H(\tau_2) e^{-\frac{i}{\hbar} H\tau_2}, \rho]_-]_- + \dots \end{aligned}$$

Таким образом, ограничиваясь в наших исследованиях рассмотрением только линейной реакции системы, получаем для возмущения статистического оператора $\delta\rho(t) = \rho(t) - \rho$ в первом порядке по $\delta H(t)$

$$\delta\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-\tau)} [\delta H(\tau), \rho]_- e^{\frac{i}{\hbar} H(t-\tau)} d\tau + \dots$$

Свяжем этот результат с реакцией на возмущение средних значений от операторов динамических величин, которые, собственно, и наблюдаются на макроскопическом уровне. Имеем

$$\langle A \rangle_t = \text{Sp} \{ A\rho(t) \} = \text{Sp} \{ A\rho \} + \text{Sp} \{ A\delta\rho(t) \} = \langle A \rangle + \delta\langle A \rangle_t,$$

откуда, делая под знаком Sp циклические перестановки оператора $e^{\frac{i}{\hbar}H(t-\tau)}$ и затем оператора $\delta H(\tau)$, получаем

$$\begin{aligned}\delta\langle A\rangle_t &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \text{Sp} \left\{ e^{\frac{i}{\hbar}H(t-\tau)} A e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-\tau)} \delta H(\tau) \rho - \delta H(\tau) e^{\frac{i}{\hbar}H(t-\tau)} A e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-\tau)} \rho \right\} + \dots = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \langle [A(t-\tau), \delta H(\tau)]_- \rangle + \dots,\end{aligned}$$

где возникшее у нас временное гейзенберговское представление оператора A определяется стандартным соотношением

$$A(t-\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t-\tau)} A e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-\tau)}.$$

Вводя под знак интеграла по $d\tau$ единичную ступенчатую функцию

$$\Theta(t-\tau) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } \tau < t, \\ 0 & \text{в случае } \tau > t, \end{cases}$$

и распространяя интегрирование на все значения $-\infty < \tau < +\infty$, получаем после замены переменной интегрирования $t-\tau = \tau' \rightarrow \tau$ окончательный результат для изменения средней величины $\delta\langle A\rangle_t = \text{Sp} \{ A \delta\rho(t) \}$, обусловленного действием на систему возмущения $\delta H(t)$, в линейном по этому возмущению приближении:

$$\delta\langle A\rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \Theta(\tau) \langle [A(\tau), \delta H(t-\tau)]_- \rangle + \dots$$

б) Адиабатическое включение периодического возмущения

Зависимость от времени возмущающей части гамильтониана $\delta H(t)$ можно в самом общем случае представить в виде разложения по дискретным частотам или в виде интеграла Фурье. Однако в линейной теории в этом нет необходимости, так как, не теряя общности рассмотрения, достаточно ограничиться исследованием реакции системы на отдельную гармонику возмущающего воздействия на нее, имея полное право затем просто просуммировать (или проинтегрировать) полученные результаты по всем частотам, определяющим $\delta H(t)$.

Итак, рассмотрим одночастотное воздействие на систему, которое, начиная с уровня $t = -\infty$ включается настолько медленно, что при этом в системе не возбуждаются характерные для нее собственные колебания. Выбирая процедуру адиабатического включения возмущения в наипростейшем варианте, положим

$$\delta H(t) = B e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t},$$

где B — операторная часть δH , а присутствие в экспоненте бесконечно малой величины $\varepsilon > 0$ обеспечивает при $\varepsilon \rightarrow 0$ адиабатический характер включения возмущения (несколько позже мы выясним, по сравнению с какими характерными для данной системы величинами параметр ε должен быть относительно малым, чтобы обеспечить адиабатичность включения $\delta H(t)$). Тогда

$$\delta\langle A\rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)\tau} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \Theta(\tau) \langle [A(\tau), B]_- \rangle,$$

и мы получаем, что

$$\begin{aligned}\delta\langle A\rangle_t &= e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)\tau} G^{\text{ret}}(A, B; \tau) = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} G^{\text{ret}}(A, B; E) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} \langle\langle A|B\rangle\rangle_{E+i\varepsilon},\end{aligned}$$

т. е., как и следовало ожидать, отклонение средней величины $\langle A\rangle_t$ от своего равновесного значения $\langle A\rangle$ совершает вынужденные колебания с частотой внешнего воздействия E/\hbar и комплексной амплитудой, которой является запаздывающая функция Грина $G^{\text{ret}}(A, B; E)$.

Сделаем несколько замечаний по поводу полученного результата.

1. Выбранная нами в гл. 2 конструкция $\langle\langle A|B\rangle\rangle_\varepsilon$, названная функцией Грина на комплексной плоскости энергии, не оказалась надуманной — она является прямым продуктом временной теории возмущений в ее линейном варианте. Отброшенные члены в выражениях для $\delta\rho(t)$ и $\delta\langle A\rangle_t$, включающие вторую и более высокие степени δH , характеризуют уже нелинейные эффекты, поэтому конструкция используемой нами функции Грина для их описания совершенно недостаточна. И дело не только в том, что эти члены включают коммутаторы от коммутаторов и являются более чем двухвременными и т. д. — пропадает привычный интерференционный принцип суперпозиции вкладов реакций на отдельные гармоники внешнего воздействия на систему и становится сомнительной вся спектральная техника, основанная на линейном преобразовании Фурье.

2. Если в приведенных выкладках сделать формальную замену $B \rightarrow \alpha B$ и определить динамическую (т. е. зависящую от частоты E/\hbar) восприимчивость системы по отношению к конкретному возмущению $\delta H(t)$ (т. е. конкретному виду B), как это принято, например, в электродинамике, то получим

$$\chi(A, B; E) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha} \delta\langle A\rangle_t e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} = \langle\langle A|B\rangle\rangle_{E+i\varepsilon},$$

в связи с чем запаздывающую функцию Грина $\langle\langle A|B\rangle\rangle_{E+i\varepsilon}$ иногда называют обобщенной восприимчивостью (так как процедура $\alpha \rightarrow 0$ сохраняет в выражении $\delta\langle A\rangle_t/\alpha$ только первый порядок по δH , то приведенная формула является точной).

3. Записывая это соотношение с использованием временного представления для $G^{\text{ret}}(A, B; t)$, получаем формулу

$$\chi(A, B; E) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} \Theta(t) \langle A(t)B - BA(t)\rangle,$$

которую часто именуют флуктуационно-диссипационной теоремой (то, что функция Грина через корреляционные функции связана с дисперсиями физических величин, мы уже выяснили в § 1, а ее связь с релаксационными процессами в системах мы обсудим несколько позже).

4. Дисперсионные соотношения для функций Грина $\langle\langle A|B\rangle\rangle_\varepsilon$, отмеченные в гл. 2, в «переводе» на язык динамических восприимчивостей $\chi(A, B; E)$ автоматически превращаются в соотношения Крамерса—Кронига, связывающие действительные и мнимые части $\chi(A, B; E)$ (см. т. 3, гл. 4, § 3).

5. Простота полученной окончательной формулы для $\delta\langle A\rangle_t$ обманлива: чтобы довести расчет этой реакции системы до разумного результата, мы должны уметь

рассчитывать средние величины типа $\langle A \rangle$ для равновесной системы, характеризуемой гамильтонианом в общем случае неидеальной системы $H = H_0 + H_1$, т. е. полностью владеть стационарной теорией возмущений (см. гл. 1, § 2, п. ж).

6. Обобщение полученных в рамках линейной теории результатов на более сложную зависимость δH от времени t уже было оговорено ранее:

$$\delta H(t) = \sum_E e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} B_E \mapsto \delta \langle A \rangle_t = \sum_E e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \langle \langle A | B_E \rangle \rangle_{E+i\epsilon}.$$

7. Полученные формулы не исключают случая статического возмущения δH . Полагая $E = 0$, т. е. $\delta H = B$, где оператор B может быть частью полного гамильтониана системы, включая случай $B = H_1$, получаем выражение для первой по δH поправки к величине $\langle A \rangle$, структура которой включает элементы двухвременного формализма, что существенно отличает ее от привычной формулы первого приближения термодинамической теории возмущений (см. гл. 1, § 2, п. ж),

$$\delta \langle A \rangle = G^{\text{ret}}(A, B; E = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J(B, A; \omega)(e^{\omega/\theta} - \eta)}{-\omega + i\epsilon} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \langle A(t)B - BA(t) \rangle.$$

8. Проведенное исследование исходило из уравнения движения для статистического оператора ρ , в котором фигурировал гамильтониан H . Он же определял временные представления оператора A и каноническое распределение, с помощью которого проводилось усреднение $\langle \dots \rangle$. Однако в гл. 2, посвященной двухвременному формализму, во всех упомянутых выше случаях вместо H фигурировал оператор $\mathcal{H} = H - \mu N$. Легко показать, что в случае, когда оператор возмущения системы $\delta H(t)$ не меняет в ней число частиц, т. е. $[H + \delta H(t), N]_- = 0$, а так как $[H, N]_- = 0$, то и $[\delta H(t), N]_- = 0$, полученные формулы для $\delta \rho(t)$ и $\delta \langle A \rangle_t$ сохраняют свой вид и в варианте большого канонического распределения с квазигейзенберговским временным представлением операторов динамических величин.

Действительно, так как оператор $e^{\pm \frac{i}{\hbar} \mu N}$ коммутирует с ρ и $\delta H(t)$, то, выделив операторную часть статистического оператора

$$\tilde{\rho} = e^{-H/\theta}, \quad \rho = \frac{\tilde{\rho}}{\text{Sp } \tilde{\rho}}, \quad \tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho} + \delta \tilde{\rho}(t),$$

получим для $\delta \tilde{\rho}(t)$ в первом порядке теории возмущений

$$\delta \tilde{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-\tau)} [\delta H(\tau), \tilde{\rho}]_- e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-\tau)} d\tau + \dots$$

Заметим попутно, что восстановление нормировки не добавляет к первому порядку дополнительных членов, так как шпур от коммутатора равен нулю, $\text{Sp } \delta \tilde{\rho}(t) = 0$ и поэтому $\text{Sp } \tilde{\rho}(t) = \text{Sp } \tilde{\rho} = Z$.

Переходя к усреднению по большому каноническому распределению, мы должны положить

$$\tilde{\rho}^{\text{b}} = \tilde{\rho} e^{\mu \frac{N}{\theta}} = e^{-\mathcal{H}/\theta}, \quad \delta \tilde{\rho}^{\text{b}}(t) = \delta \tilde{\rho}(t) e^{\mu \frac{N}{\theta}}, \quad \tilde{\rho}^{\text{b}}(t) = \tilde{\rho}^{\text{b}} + \delta \tilde{\rho}^{\text{b}}(t)$$

и к операции Sp добавить суммирование по числу частиц N . Так как по-прежнему

$$\text{Sp } \delta \tilde{\rho}^{\text{b}}(t) = 0, \quad \text{Sp } \{ \tilde{\rho}^{\text{b}} + \delta \tilde{\rho}^{\text{b}}(t) \} = \text{Sp } e^{-\mathcal{H}/\theta} = \zeta$$

и

$$\langle A \rangle_t^B = \frac{\text{Sp} \{ (\tilde{\rho}^B + \delta \tilde{\rho}^B(t)) A \}}{\text{Sp} \tilde{\rho}^B} = \langle A \rangle^B + \delta \langle A \rangle_t^B,$$

то, подставляя $\delta \tilde{\rho}(t)$ в написанное выражение, получаем, повторяя всю последовательность проведенных ранее выкладок,

$$\delta \langle A \rangle_t^B = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \sum_{N=0}^{\infty} \text{Sp} \left\{ A^B(t-\tau) \delta H(\tau) \frac{1}{\zeta} e^{-\frac{H-\mu N}{\theta}} - \delta H(\tau) A^B(t-\tau) \frac{1}{\zeta} e^{-\frac{H-\mu N}{\theta}} \right\} + \dots,$$

где мы обозначили

$$A^B(t-\tau) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-\tau)} A e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t-\tau)},$$

или окончательно

$$\delta \langle A \rangle_t^B = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau \langle [A^B(t-\tau), \delta H(\tau)]_- \rangle^B + \dots$$

Так как эта формула отличается от полученной ранее только тем, что в ней вместо оператора H везде стоит $\mathcal{H} = H - \mu N$, а вместо статистической суммы Z — большая статистическая сумма ζ , то, используя в дальнейшем каноническое или большое каноническое распределение, мы не будем фиксировать уже ненужный верхний индекс «Б».

в) Возбужденные состояния и резонансные свойства статистической системы

Проблема определения понятия возбужденных состояний статистических систем является в статистической физике достаточно деликатной, так как основополагающие ее положения этого понятия не содержат. В квантовой механике эта проблема решается изначально: собственные функции оператора Гамильтона, являясь решением стационарного уравнения Шредингера, определяют и основное состояние системы, и возбужденные ее состояния, а собственные значения — весь спектр энергий возбужденных состояний, начиная с основного. Рассматривая статистические системы, мы тоже хотели бы теоретически определить, что такое возникающее над равновесным ее возбужденное состояние, тем более, что такие состояния реально существуют в разных системах в виде акустических волн, плазменных колебаний, спиновых волн и т. д. Однако использовать для этого напрямую квантово-механическую идеологию невозможно, так как существование «температурного» обобщения уравнения Шредингера и зависящих от температуры и других термодинамических, т. е. макроскопических переменных (являющихся в статистическом понимании средними значениями по смешанному состоянию уже равновесной системы) собственных его значений было бы самопротиворечивым в принципе. Ввиду того что роль основного состояния, над которым возможно существование возбужденных состояний, в статистических системах играет их равновесное состояние, фиксируемое матрицей плотности ρ как смешанное состояние, в структуру которого входят абсолютно все квантово-механические возбужденные состояния (т. е. все стационарные решения уравнения Шредингера), структура возбужденных состояний статистических систем с микроскопической точки зрения тоже должна определяться соответственно изменением, но этим же полным набором решений уравнения Шредингера.

Далее, в отличие от бесконечно долго живущих квантово-механических стационарных состояний, любые возбужденные состояния статистических систем, в принципе подчиненных нулевому началу термодинамики (см. т. 1, гл. 1, § 1), обязаны затухать, т. е. характеризоваться помимо амплитуды еще двумя параметрами — энергией (или собственной частотой) Ω и временем жизни τ (или затуханием $\Gamma = 1/\tau$), причем, в соответствии с общепринятыми нормами релейской теории колебаний, о реальном существовании таких возбуждений можно говорить лишь в случаях $\Gamma/\Omega \ll 1$.

В связи со сказанным мы естественно подходим к той идеологии, которой мы обязаны ранней работе Г. А. Гамова 1928 г., посвященной качественной теории α -распада, в которой он не только объяснил это явление как процесс квантово-механического туннелирования через потенциальный барьер, но и ввел понятие квазистационарных уровней энергии $\tilde{\Omega} = \Omega - i\Gamma$, которое после некоторого периода недоверия стало применяться теоретиками в самых разных исследованиях (например, слабый резонанс, обнаруженный с помощью мощного ускорителя, тут же объявляется новой частицей с массой, соответствующей резонансной частоте, и временем жизни, определяемым по спектральной ширине этого максимума), особенно в тех задачах, где решение динамической задачи в прямой квантово-механической трактовке оказывается по каким-либо причинам затруднительным.

Такой в известной степени альтернативный подход совершенно не связан с тем, является ли система квантово-механической (т. е. при $\theta = 0$), состояния которой описываются волновыми функциями (т. е. чистыми состояниями), или статистической (т. е. при $\theta \neq 0$), состояния которой как смешанные квантово-механические состояния характеризуются уже статистическим оператором ρ , называемым матрицей плотности. Так как иного выбора у нас просто нет, то, используя единственную оставшуюся возможность, мы должны, рассматривая возбужденные состояния статистических систем, сосредоточить свое внимание на исследовании их спектральных свойств, используя при этом в полной мере идеологию универсальной во всех областях физики теории колебаний.

Чтобы не загромождать уже формальное изложение принятой выше установки излишними сложностями и помня, что в линейной теории реакции системы существует принцип суперпозиции, воспользуемся приемом, использованным в гл. 2, § 2, п. е), выделив в спектральной плотности $J'(\omega)$ (операторных аргументов писать не будем) отдельный максимум (см. рис. 13 в гл. 2)

$$J'(\omega) = \frac{\frac{1}{\pi}\Gamma}{(\omega - \Omega)^2 + \Gamma^2}, \quad \lim_{\Gamma \rightarrow 0} J'(\omega) = \delta(\omega - \Omega), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J'(\omega) = 1.$$

Чтобы определить ту часть необходимой для определения реакции системы $\delta\langle A \rangle_t$ общей запаздывающей функции Грина, которая связана с этой конструкцией $J'(\omega)$, воспользуемся уже проделанной в гл. 2 выкладкой, проведя ее в обратном порядке. Тогда получим

$$G^{\text{ret}}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J'(\omega)}{E - \omega + i\epsilon} = \frac{1}{E - \Omega + i\Gamma},$$

и соответствующая часть наблюдаемой реакции системы будет иметь стандартный с точки зрения теории колебаний вид

$$\delta\langle A \rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} G^{\text{ret}}(E) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t - i\varphi} \frac{1}{\sqrt{(E - \Omega)^2 + \Gamma^2}}, \quad \varphi = \arctg \frac{\Gamma}{E - \Omega},$$

с размытым на величину затухания Γ резонансом вынужденных колебаний на частоте внешнего воздействия $E^{\text{рез}} = \Omega$ и запаздыванием по фазе на величину φ .

Этот резонанс на частоте собственных колебаний системы определяет энергию Ω ее возбужденного состояния, и величина Γ — время жизни этого возбуждения, причем обе эти величины определяют действительную и мнимую координаты полюса $\tilde{\mathcal{E}}$ запаздывающей функции Грина $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$ в нижней полуплоскости энергии,

$$\tilde{\mathcal{E}} - \Omega + i\Gamma = 0, \quad \text{Re } \tilde{\mathcal{E}} = \Omega, \quad \text{Im } \tilde{\mathcal{E}} = -\Gamma.$$

Чтобы приведенная выкладка не показалась слишком примитивной, повторим ее еще раз, придав ей слегка квантово-полевую окраску. Пусть одночастичная функция Грина (см. § 1, п. б) этой главы) представлена в форме

$$\langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = G_p(\mathcal{E}) = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_p - \mathfrak{M}_p(\mathcal{E})}$$

(ради простоты амплитудный коэффициент заменен единицей). Предположим, что в результате конкретных расчетов и приближений вид массового оператора $\mathfrak{M}_p(\mathcal{E})$ стал известен. Рассматривая значение $\mathcal{E} = E + i\varepsilon$, соответствующее запаздывающей функции Грина, выделим в нем действительную и мнимую части,

$$\mathfrak{M}_p(E + i\varepsilon) = M_p(E) - i\Gamma_p(E),$$

где вследствие заданности аналитических свойств $G^{\text{ret}}(\mathcal{E})$ функция $\Gamma_p(E) > 0$ при всех значениях E .

Обозначая подлежащие определению координаты полюса аналитического продолжения запаздывающей функции Грина на \mathcal{E} -плоскость $G_p^{\text{ret}}(\mathcal{E})$ как

$$\tilde{\mathcal{E}} = E(p) - i\Gamma(p),$$

получаем для действительных функций $E(p)$ (резонансная частота) и $\Gamma(p)$ (затухание) комплексное уравнение

$$0 = E(p) - i\Gamma(p) - \varepsilon_p - M_p(E(p) - i\Gamma(p)) + i\Gamma_p(E(p) - i\Gamma(p)),$$

которое имеет смысл рассматривать только в случае

$$\Gamma(p) \ll E(p).$$

Представляя аналитическое продолжение действительной функции M_p , связанное с небольшим сдвигом ее аргумента с действительной оси в нижнюю полуплоскость энергии, в виде разложения

$$M_p(E(p) - i\Gamma(p)) = M_p(E(p)) - i \frac{\partial M(E(p))}{\partial E(p)} \Gamma(p) + \dots,$$

получим, приравнявая нулю действительную и мнимую части комплексного уравнения, в самом грубом приближении уже два уравнения для действительных функций $E(p)$ и $\Gamma(p)$

$$\begin{cases} E(p) = \varepsilon_p + M_p(E(p)), \\ \Gamma(p) = \frac{\Gamma_p(E(p))}{\left(1 + \frac{\partial M_p(E(p))}{\partial E(p)}\right)}, \end{cases}$$

из которых первое является чистым уравнением для резонансной частоты $E(p)$ (т. е. энергии возбужденного состояния системы или, что то же, собственного ее колебания), а второе после подстановки в его правую часть решения для $E(p)$ определяет затухание этого одночастичного возбуждения системы.

г) Неадиабатическое включение возмущения и процессы релаксации

Сохраняя в операторе возмущения $\delta H(t)$ по-прежнему только одну гармонику, рассмотрим случай более общего способа его включения

$$\delta H(t) = g(t - t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} B,$$

где функция включения возмущения $g(t - t_0)$, оставаясь достаточно произвольной (см. рис. 15), при $t \rightarrow -\infty$ равна нулю (возмущения системы еще нет), а при $t \geq t_0$ — единице (полностью включенное возмущение).

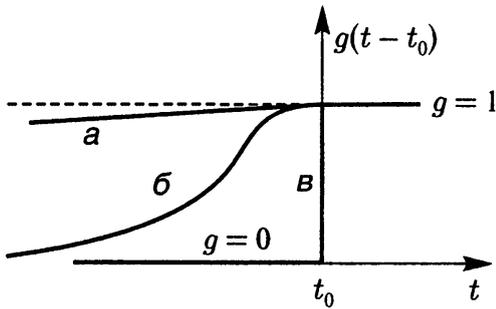


Рис. 15. Графики функций $g(t - t_0)$ адиабатического (а), произвольного (б) и мгновенного (в) способов включения возмущения $\delta H(t)$

В качестве «резерва» мы сохранили в этой форме фактор $e^{\epsilon t}$, чтобы не исключать рассмотренный ранее вариант адиабатического включения возмущения. Таким образом, мы получили возможность в единой форме рассматривать оба наиболее часто используемых в приложениях противоположных по характеру варианта включения возмущения: полагая всюду $g(t - t_0) = 1$, мы имеем адиабатический вариант включения возмущения, а в случае

$$g(t - t_0) = \Theta(t - t_0) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } t > t_0, \\ 0 & \text{в случае } t < t_0, \end{cases}$$

— его антипод — мгновенное включение возмущения в момент $t = t_0$.

В приведенных ранее (см. пункт а) этого параграфа) выкладках почти ничего не изменится, поэтому сразу имеем для реакции на $\delta H(t)$ среднего значения $\langle A \rangle_t$

$$\delta \langle A \rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)\tau} g(t - t_0 - \tau) G^{\text{ret}}(A, B; \tau).$$

Выделяя в этом выражении рассмотренную в п. б) этого параграфа часть, соответствующую установившимся вынужденным колебаниям системы, получим выражение

$$\delta \langle A \rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} G^{\text{ret}}(A, B; E) - e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)\tau} (1 - g(t - t_0 - \tau)) G^{\text{ret}}(A, B; \tau),$$

в котором второе слагаемое описывает релаксационный процесс, приближающий систему к регулярным колебаниям с вынужденной частотой E .

Чтобы представить этот процесс в наиболее наглядном виде, рассмотрим вариант мгновенного включения возмущения, когда

$$\delta \langle A \rangle_t = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \int_0^{t-t_0} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)\tau} G^{\text{ret}}(A, B; \tau) = \begin{cases} 0 & \text{в случае } t < t_0, \\ e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} G^{\text{ret}}(A, B; E) - \int_{t-t_0}^{\infty} d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)\tau} G^{\text{ret}}(A, B; \tau) & \text{в случае } t > t_0 \end{cases}$$

и когда, как и в предыдущих пунктах б) и в), в качестве G^{ret} выбирается наипростейшая однополюсная конструкция

$$G^{\text{ret}}(E) = \frac{1}{E - \Omega + i\Gamma}; \quad G^{\text{ret}}(\tau) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{iE\tau} G^{\text{ret}}(E) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(\tau) e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega\tau - \frac{\Gamma}{\hbar}\tau}.$$

Тогда, проводя элементарное интегрирование, для релаксационной части реакции среднего значения $\langle A \rangle_t$ получаем при $t > t_0$

$$\delta\langle A \rangle_{\text{рел}} = -e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t_0 - i\varphi} \frac{1}{\sqrt{(E - \Omega)^2 + \Gamma^2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega(t-t_0) - \frac{\Gamma}{\hbar}(t-t_0)} = \tilde{A} e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega(t-t_0) - \frac{\Gamma}{\hbar}(t-t_0)}.$$

Таким образом, мгновенное включение возмущения (как и любые другие неадиабатические его варианты) возбуждает в системе собственные колебания, экспоненциальное затухание амплитуды которых характеризуется средним временем их жизни $\tau = \hbar/\Gamma$.

Так как использованная нами показательная модель для $G^{\text{ret}}(E)$ представляет, как мы уже отмечали, лишь отдельное слагаемое в общей конструкции функции Грина $G^{\text{ret}}(A, B; E)$, характеризуемой несколькими или даже многими полюсами на плоскости энергии, т. е. многими собственными частотами Ω_n и временами релаксации $\tau_n = \hbar/\Gamma_n$, то условие адиабатичности включения возмущения $\delta H(t)$, такого, которое не возбуждает ни одного собственного колебания системы, на языке ϵ -процедуры будет выглядеть как

$$\epsilon \ll \Gamma_{\min},$$

где Γ_{\min} — наименьшее из всех значений Γ_n .

§ 3. Функции Грина и линеаризованные кинетические уравнения

Как мы показали в гл. 2, формализм функций $\langle\langle A|B \rangle\rangle_\epsilon$ вытекает из временной теории возмущений в первом ее порядке, а это значит, что весь метод двухвременных функций Грина в кинетическом плане рассчитан не более, чем на описание слабонервновесных систем. Этой же цели (см. т. 3, гл. 5, § 5, б) служат все линеаризованные варианты кинетических уравнений, описывающих эволюцию статистических систем, когда одночастичная функция распределения $f(t)$ представляется в виде малого отклонения от ее равновесного (или локально-равновесного) значения f_0 ,

$$f(t) = f_0 + \delta f(t), \quad \delta f(t) \ll f_0.$$

Так как с физической точки зрения эти подходы эквивалентны, то связь обоих формализмов напрашивается сама собой.

а) Уравнение движения для динамической реакции средних значений как основа построения кинетических уравнений и запаздывающие функции Грина

Кинетические уравнения в общем неклассическом случае вытекают из уравнений для корреляционных операторов F_s (в основном для случаев $s = 1$ и $s = 2$), матричное представление которых выражается через средние значения от комбинаций

$v^s \langle a_{p_1}^+ \dots a_{p_s}^+ a_{p'_s} \dots a_{p'_1} \rangle$, так что при установлении упомянутой выше связи выбор операторов A и B уже не произволен, а достаточно конкретен.

Чтобы не утруждать себя постоянными ссылками на изложенный ранее материал, рассмотрим с некоторыми вариациями как бы снова уравнение движения для среднего значения оператора A под действием возмущения $\delta H(t)$, которое, имея в виду лишь линейную реакцию системы, выберем, как и раньше, в простейшей форме

$$\delta H(t) = U(t)\delta\xi = B e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \delta\xi,$$

выделив в ней явно фактор интенсивности, по которому будем затем варьировать полученные выражения (или просто брать производную по $\delta\xi$). Обобщение структуры $\delta H(t)$ несложно; можно, например, положить

$$\delta H(t) = \sum_q U_q(t)\delta\xi_q \quad \text{или даже} \quad \delta H(t) = \int U(x;t)\delta\xi(x) dx,$$

однако в линеаризованном приближении подобное формальное усложнение ничего качественно нового не прибавляет, и мы ограничимся успешно рассмотренной ранее одночастотной формой $\delta H(t)$. Имеем

$$\langle A \rangle_t = \text{Sp} \{ A\rho + A\delta\rho(t) \} = \langle A \rangle + \delta\langle A \rangle_t = \langle A \rangle + \langle \widetilde{A} \rangle_t \delta\xi,$$

где, согласно гл. 2,

$$\langle \widetilde{A} \rangle_t = \left. \frac{\delta\langle A \rangle_t}{\delta\xi} \right|_{\delta\xi=0} = e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \langle\langle A|B \rangle\rangle_{E+i\epsilon}.$$

Так как

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \delta\rho(t) = [H + \delta H(t), \rho + \delta\rho(t)]_-,$$

то уравнение движения для среднего значения $\langle A \rangle_t$ приобретает вид

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle_t &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \delta\langle A \rangle_t = \text{Sp} \{ A[H + \delta H(t), \rho + \delta\rho(t)]_- \} = \\ &= \text{Sp} \{ [A, \delta H(t)]_- \rho + [A, H]_- \delta\rho(t) + [A, \delta H(t)]_- \delta\rho(t) \} = \\ &= \langle [A, \delta H(t)]_- \rangle + \delta \langle [A, H]_- \rangle_t + \delta \langle [A, \delta H(t)]_- \rangle_t. \end{aligned}$$

Если, подставив в это уравнение $\delta H(t) = U(t)\delta\xi$ и разделив его почленно на $\delta\xi$, мы затем устремим $\delta\xi$ к нулю, то в пределе $\delta\xi = 0$ исчезнет пропорциональное $(\delta\xi)^2$ последнее слагаемое в правой части, и мы получим точное уравнение для амплитуды реакции системы

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \langle \widetilde{A} \rangle_t = \langle [A, U(t)]_- \rangle + \langle [A, H]_- \rangle_t.$$

Так как амплитудная величина реакции среднего значения от операторов A и $[A, H]_-$, обозначаемая волной сверху, непосредственно связана с запаздывающей функцией Грина, то, взяв производную от $e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}$ и затем сократив на эту экспоненту все слагаемые в написанном выше уравнении для $\langle \widetilde{A} \rangle_t$, мы приходим к знакомому по гл. 2 уравнению для запаздывающей функции Грина коммутационного типа

$$(E + i\epsilon) \langle\langle A|B \rangle\rangle_{E+i\epsilon} = \langle [A, B]_- \rangle + \langle\langle [A, H]_- | B \rangle\rangle_{E+i\epsilon}.$$

Чтобы уравнение движения для величины $\langle A \rangle_t$ и эквивалентное ему уравнение для функции Грина соответствовали бы линеаризованному варианту кинетического уравнения, необходимо совершенно конкретным образом выбрать операторную конструкцию для A . Этот выбор уже определен в гл. 1, § 4 формулами

$$\begin{aligned} (p'_1, \dots, p'_s | F_s | p_1, \dots, p_s) &= v^s \langle a_{p'_1}^+ \dots a_{p'_s}^+ a_{p_s} \dots a_{p_1} \rangle, \\ (x'_1, \dots, x'_s | F_s | x_1, \dots, x_s) &= v^s \langle \Psi^+(x_1) \dots \Psi^+(x_s) \Psi(x'_s) \dots \Psi(x'_1) \rangle, \end{aligned}$$

определяющими оператор F_s в импульсном и координатном представлениях. Выбирая оператор A_s в соответствующем представлении, получаем для s -частичного статистического оператора

$$F_s(t) = \langle A_s \rangle_t = F_s + \delta F_s(t).$$

Так как мы показали, что уравнение движения для

$$\delta F_s(t) = \delta \langle A_s \rangle_t$$

(т. е. кинетическое уравнение для связанной со статистическим оператором F_s s -частичной функции распределения) полностью эквивалентно соответствующему уравнению для функции Грина, то возникает естественный вопрос о целесообразности использования подобного теоретического параллелизма. Однако в пользу этого дуализма имеются все же достаточно убедительные соображения.

Во-первых, несмотря на то что целый ряд проблем исследуется этими методами эквивалентным образом (например, проблема малых колебаний в системе и т. п.), в кинетической теории обсуждение и интерпретация этих явлений выглядит намного нагляднее или, как говорят, «физичнее».

Во-вторых, кинетические уравнения рассматриваются теоретиками сравнительно давно, и в этом деле накоплен значительный опыт. Закрытое кинетическое уравнение — это реализация какой-то определенной аппроксимационной программы (иногда основанной на качественных «общефизических» соображениях). Если мы, учитывая возмущение $\delta H(t)$, проварьировем это уже закрытое уравнение, превратив его в линеаризованное по δF_s , мы получим уравнение для G^{ret} в приближении, соответствующем данному кинетическому уравнению, возмущенному внешним воздействием $\delta H(t)$. Такая функция Грина имеет уже и самостоятельный интерес, так как участвует в рассмотрении целого ряда иных прикладных вопросов теории.

В-третьих, точные уравнения для G^{ret} образуют бесконечную цепочку уравнений, а уравнение для δF_s , полученное указанным выше способом, является закрытым (так как уравнение для F_s было закрыто при его построении, например, как уравнение Больцмана или уравнение Власова для F_1). Таким образом, мы получаем конкретную рецептуру расщепления цепочки уравнений для функций Грина G^{ret} , согласованную с определенным физическим приближением, полностью заимствованным из кинетической теории.

б) Построение уравнения для одночастичного статистического оператора и соответствующего ему уравнения для функции Грина

Основным исходным моментом для построения кинетических уравнений является общее уравнение движения для s -частичного статистического оператора,

полученное нами в гл. 1, § 4, п. в),

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} F_s(1, \dots, s; t) = [H_s, F_s(1, \dots, s; t)]_- + \\ + \frac{1}{v} \sum_{1 \leq i \leq s} \text{Sp}_{(s+1)} [\Phi(i, s+1), F_{s+1}(1, \dots, s, s+1; t)]_- ,$$

где H_s — гамильтониан группы частиц $(1, \dots, s)$. В нашем случае

$$F_s(t) = F_s + \delta F_s(t), \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} F_s = 0,$$

а величина $\delta F_s(t)$ непосредственно связана с возмущением системы $\delta H(t)$, составляющим часть общего гамильтониана системы $H(t) = H + \delta H(t)$. Поэтому, проварьировав написанное выше уравнение по интенсивности внешнего возмущения, учтя, что $H_s(t) = H_s + \delta H_s(t)$, и опустив члены второго порядка, сразу получим цепочку линеаризованных уравнений для $\delta F_s(t)$ в виде

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \delta F_s(t) = [H_s, \delta F_s]_- + \frac{1}{v} \sum_{1 \leq i \leq s} \text{Sp}_{(s+1)} [\Phi(i, s+1), \delta F_{s+1}]_- + [\delta H_s, F_s]_- . \quad (*)$$

Чтобы перевести это уравнение на язык гриновских функций, мы должны положить, желая работать в импульсном представлении, согласно гл. 1, § 4, п. б)

$$A_s = v^s a_{p_1}^+ \dots a_{p_s}^+ a_{p'_s} \dots a_{p'_1}$$

или в координатном варианте

$$A_s = v^s \Psi^+(x_1) \dots \Psi^+(x_s) \Psi(x'_s) \dots \Psi(x'_1)$$

и учесть, что

$$\delta F_s(t) = \delta \langle A_s \rangle_t = \langle \langle A_s | U \rangle \rangle_{E+i\epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}, \quad (**)$$

где U — операторная часть возмущения $\delta H(t)$.

Тогда уравнение (*) в полном соответствии с пунктом а) этого параграфа превратится в цепочку точных уравнений для функций Грина

$$(E + i\epsilon) \langle \langle A_s | U \rangle \rangle_{E+i\epsilon} = [H_s, \langle \langle A_s | U \rangle \rangle_{E+i\epsilon}]_- + \\ + \frac{1}{v} \sum_{1 \leq i \leq s} \text{Sp}_{(s+1)} [\Phi(i, s+1), \langle \langle A_{s+1} | U \rangle \rangle_{E+i\epsilon}]_- + [U_s, \langle A_s \rangle]_- . \quad (***)$$

Чтобы сделать дальнейшее изложение совершенно конкретным, выберем самый простой, но вполне реальный тип возмущения $\delta H(t)$, положив

$$\delta H(\mathbf{r}; t) = U(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t},$$

т. е. представив его в виде периодически изменяющегося скалярного поля, действующего на частицы системы (конечно, возможны другие конструкции оператора U , описывающие более сложные варианты внешнего воздействия на частицы системы, но их учет приведет к образованию более сложных операторных конструкций и соответственно более сложных функций Грина).

Чтобы перейти к построению гриновского аналога одночастичных уравнений, которые традиционно составляются для одночастичных функций распределения, положим $s = 1$ ($s + 1 = 2$) и рассмотрим сначала вариант координатного представления. Имеем

$$H = \int \Psi^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \Psi(x) dx + \frac{1}{2} \iint \Phi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Psi^+(x) \Psi^+(x') \Psi(x') \Psi(x) dx dx',$$

$$\delta H(t) = \int \Psi^+(x) U(\mathbf{r}) \Psi(x) dx e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}.$$

Так как в матричном x -представлении (напомним, что $x = (\mathbf{r}, \sigma)$)

$$\langle x'_1 | H(1) | x_1 \rangle = \delta(x_1 - x'_1) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \right),$$

$$\langle x'_1, x'_2 | \Phi(1, 2) | x_1, x_2 \rangle = \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|),$$

$$\langle x'_1 | \delta H(t) | x_1 \rangle = \delta(x_1 - x'_1) U(\mathbf{r}_1) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t},$$

то уравнение (*) приобретает вид

$$(\Upsilon) \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \langle x'_1 | \delta F_1 | x_1 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta'_1 - \Delta_1) \langle x'_1 | \delta F_1 | x_1 \rangle +$$

$$+ \frac{1}{v} \int dx_2 (\Phi(|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2|) - \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)) \langle x'_1 x_2 | \delta F_2 | x_1 x_2 \rangle +$$

$$+ (U(\mathbf{r}'_1) - U(\mathbf{r}_1)) \langle x'_1 | F_1 | x_1 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}$$

(это уравнение нам понадобится в дальнейшем при переходе к смешанному координатно-импульсному представлению).

Не выписывая уравнение (Υ) в гриновском варианте с использованием операторов Ψ^+ и Ψ , сразу рассмотрим наиболее употребительное в квантовой статистике импульсное представление. Фактически повторяя проведенную только что процедуру, имеем

$$H + \delta H(t) = \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_{pp'} a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p + \frac{1}{V} \sum_q u(q) \rho_q^+ e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t},$$

где

$$\rho_q = \sum_p a_{p+q}^+ a_p, \quad \rho_q^+ = \rho_{-q},$$

а $u(q)$ — фурье-образ потенциала $U(\mathbf{r})$. В p -представлении (напомним, что $p = (\mathbf{p}, \sigma)$) элементы гамильтониана $H(t) = H + \delta H(t)$ имеют вид

$$\langle p' | H_0 | p \rangle = \Delta(p - p') E_p,$$

$$\langle p'_1, p'_2 | \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) | p_1, p_2 \rangle = \frac{1}{V} \Delta(p_1 + p_2 - p'_1 - p'_2) \nu(p_1 - p'_1),$$

$$\langle p' | \delta H(t) | p \rangle = \frac{1}{V} u(p - p') e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}.$$

Так как в уравнение (*) входят статистические операторы F_1 и F_2 , то в том же p -представлении имеем согласно (**)

$$\begin{aligned}\langle p'_1 | F_1 | p_1 \rangle &= v \langle a_{p'_1}^+ a_{p_1} \rangle, \\ \langle p'_1, p'_2 | F_2 | p_1, p_2 \rangle &= v^2 \langle a_{p'_1}^+ a_{p'_2}^+ a_{p_2} a_{p_1} \rangle, \\ \langle p'_1 | \delta F_1 | p_1 \rangle &= v \sum_q \frac{1}{V} u(q) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} \langle \langle a_{p'_1}^+ a_{p_1} | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon}, \\ \langle p'_1, p'_2 | \delta F_2 | p_1, p_2 \rangle &= v^2 \sum_q \frac{1}{V} u(q) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} \langle \langle a_{p'_1}^+ a_{p'_2}^+ a_{p_2} a_{p_1} | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon}.\end{aligned}$$

Преодолевая основную трудность — расчет коммутаторов, получаем, аккуратно следя за правильной расстановкой индексов и импульсных переменных,

$$\begin{aligned}\sum_{p''} (\langle p'_1 | H_0 | p'' \rangle \langle p'' | \delta F_1 | p_1 \rangle - \langle p'_1 | \delta F_1 | p'' \rangle \langle p'' | H_0 | p_1 \rangle) &= (E_{p'_1} - E_{p_1}) \langle p'_1 | \delta F_1 | p_1 \rangle, \\ \sum_{p''} (\langle p'_1 | \delta H | p'' \rangle \langle p'' | F_1 | p_1 \rangle - \langle p'_1 | F_1 | p'' \rangle \langle p'' | \delta H | p_1 \rangle) &= \\ &= \sum_{p''} \left(\frac{1}{V} u(p'' - p'_1) v \langle a_{p''}^+ a_{p'_1} \rangle - \frac{1}{V} u(p_1 - p'') v \langle a_{p''}^+ a_{p'_1} \rangle \right) = \\ &= \frac{1}{V} \sum_q v u(q) \langle a_{p'_1}^+ a_{p'_1+q} - a_{p_1-q}^+ a_{p'_1} \rangle.\end{aligned}$$

Наконец, самое трудоемкое — это преобразование в p -представление величины

$$\frac{1}{v} \text{Sp}_{(2)} [\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \delta F_2]_-.$$

Имеем для этой части уравнения

$$\frac{1}{v} \sum_{p'_1 p'_2 p_2} (\langle p'_1, p_2 | \Phi | p'_1, p'_2 \rangle \langle p'_1, p'_2 | \delta F_2 | p_1, p_2 \rangle - \langle p'_1, p_2 | \delta F_2 | p'_1, p'_2 \rangle \langle p'_1, p'_2 | \Phi | p_1, p_2 \rangle).$$

В первой части этого коммутатора в выражении

$$\frac{1}{v} \sum_q \frac{1}{V} \Delta(p'_1 + p_2 - p'_1 - p'_2) \nu(p'_1 - p'_1) v^2 \frac{1}{V} u(q) a_{p'_1}^+ a_{p'_2}^+ a_{p_2} a_{p'_1}$$

введем новую переменную $q' = p'_1 - p'_1$, исключим $p'_1 = p'_1 + q'$ из оператора $a_{p'_1}$ и Δ -функции, действие которой снимает одно из суммирований, полагая $p'_2 = p_2 - q'$, и получим

$$\frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \sum_q v \frac{1}{V} u(q) a_{p_1}^+ \sum_{p_2} a_{p_2}^+ a_{p_2-q'} a_{p_1+q'} = \frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \sum_q v \frac{1}{V} u(q) a_{p_1}^+ \rho_{q'} a_{p_1+q'}.$$

Во второй сумме коммутатора в выражении

$$-\frac{1}{v} \sum_q v^2 \frac{1}{V} u(q) a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p_2} a_{p_1} \frac{1}{V} \Delta(p_1'' + p_2'' - p_1 - p_2) \nu(p_1'' - p_1)$$

положим $p_1'' - p_1 = -q'$, исключим $p_1'' = p_1 - q'$ из оператора $a_{p_1}^+$ и Δ -функции, действие которой позволяет исключить величину $p_2'' = p_2 + q'$. Тогда получим

$$-\frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \sum_q v \frac{1}{V} u(q) a_{p_1 - q'}^+ \sum_{p_2} a_{p_2 + q'}^+ a_{p_2} a_{p_1} = -\frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \sum_q v \frac{1}{V} u(q) a_{p_1 - q'}^+ \rho_{q'} a_{p_1}.$$

Собирая вместе все результаты, подставив их в уравнение (*), взяв производную по t и сократив все слагаемые на $e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t}$, получим

$$\begin{aligned} (E + i\varepsilon) \sum_q v \frac{1}{V} u(q) \langle \langle a_{p_1}^+ a_{p_1} | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} &= (E_{p_1'} - E_{p_1}) \sum_q v \frac{1}{V} u(q) \langle \langle a_{p_1}^+ a_{p_1} | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \sum_q v \frac{1}{V} u(q) \langle \langle a_{p_1}^+ \rho_{q'} a_{p_1 + q'} - a_{p_1 - q'}^+ \rho_{q'} a_{p_1} | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} + \\ &+ \sum_q v \frac{1}{V} u(q) \langle \langle a_{p_1}^+ a_{p_1 + q} - a_{p_1 - q}^+ a_{p_1} \rangle \rangle. \end{aligned}$$

Отметим, во-первых, что выписав это уравнение, мы построили в импульсном представлении уравнение (***) . Во-вторых (и это главное), взяв вариационную производную по величине $\nu u(q)/V$, присутствующей в каждом слагаемом этого уравнения, мы снимаем суммирование по q . И наконец, взяв эту вариационную производную при $u(q) = 0$, мы обеспечим сохранение импульса в присутствующих во всех членах этого уравнения средних значениях, т. е. нетривиальное решение этого уравнения будет соответствовать только случаю $p_1 = p_1' + q$. Обозначая $p_1' = p$, получаем окончательно

$$\begin{aligned} (E + i\varepsilon + E_{p+q} - E_p) \langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} &= \langle a_{p+q}^+ a_{p+q} - a_p^+ a_p \rangle + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \langle \langle a_{p+q}^+ \rho_{q'} a_{p+q'} - a_{p+q-q'}^+ \rho_{q'} a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon}. \end{aligned}$$

В полном соответствии с программой, изложенной в пункте а) этого параграфа, мы получили точное уравнение для системы, характеризуемой гамильтонианом H без возмущения $\delta H(t)$ (т. е. предоставленной самой себе). Это уравнение по построению является первым в цепочке уравнений, определяющих одночастичный статистический оператор, т. е. гарантированно содержит в себе линеаризованный вариант кинетического уравнения для одночастичной функции распределения. Если бы мы знали заранее, что именно выбор операторов $A = a_{p+q}^+ a_p$ и $B = \rho_q^+$ соответствует кинетическому варианту для функции Грина $\langle \langle A|B \rangle \rangle_{E+i\varepsilon}$, то это уравнение можно было бы получить сразу, сосчитав только один коммутатор $[A, H]$. Однако этот выбор операторов A и B заранее никем не был определен или подсказан, и наш в основном «арифметический» труд по получению этого уравнения не был напрасным. Наконец, нам в конечном счете нужно не точное уравнение цепочки, произошедшее из точного же уравнения Лиувилля—фон Неймана, а приближенное замкнутое уравнение, соответствующее уравнению для одночастичной функции распределения.

в) Переход к координатно-импульсному представлению и использование аппроксимаций, заложенных в кинетических уравнениях классической теории

Кинетические уравнения для систем, определяемых гамильтонианом рассматриваемого нами типа

$$H = \sum_{1 \leq i \leq N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|),$$

обычно составляются для одночастичной функции распределения, зависящей помимо времени от координаты и импульса частицы.

Поэтому, чтобы сопоставить развиваемый в этом параграфе подход с известными уравнениями физической кинетики, неизбежно возникает необходимость в вигнеровской процедуре перехода к смешанному представлению к квазиклассическому приближению. В гл. 1 (см. § 2, п. ж)), введя вместо координат \mathbf{r} и \mathbf{r}' переменные

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}' + \mathbf{r}}{2}, \quad \tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}' - \mathbf{r},$$

мы показали, что одночастичный статистический оператор в смешанном представлении определяется через его координатное представление с помощью интегрального преобразования

$$F_1(\mathbf{p}, \mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \left\langle \mathbf{R} + \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2} \left| F_1 \right| \mathbf{R} - \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2} \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{\mathbf{r}} \mathbf{p}} d\tilde{\mathbf{r}}.$$

Используя эту процедуру перехода, выпишем необходимые нам обратные соотношения,

$$\langle \mathbf{r}'_1 | F_1 | \mathbf{r}_1 \rangle = \int F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} d\mathbf{p}_1,$$

$$\langle \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2 | F_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \int F_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{R}_2) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_2 \tilde{\mathbf{r}}_2} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2.$$

Учитывая, что разность лапласианов, действующих на переменные \mathbf{r}' и \mathbf{r} в новых переменных имеет вид

$$\Delta' - \Delta = 2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R} \partial \tilde{\mathbf{r}}}$$

и что

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{r}}_1} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} = \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1},$$

запишем первое слагаемое правой части уравнения (γ), разделив его на $i\hbar$, в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) (\Delta'_1 - \Delta_1) \langle \mathbf{r}'_1 | \delta F_1 | \mathbf{r}_1 \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) 2 \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_1 \partial \tilde{\mathbf{r}}_1} \delta F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} d\mathbf{p}_1 = \\ &= \int \left(-\frac{\mathbf{p}_1}{m} \frac{\partial \delta F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1)}{\partial \mathbf{R}_1} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} d\mathbf{p}_1. \end{aligned}$$

Разность потенциалов $U(\mathbf{r}') - U(\mathbf{r})$, фигурирующая в третьем слагаемом правой части уравнения (γ), была представлена в гл. 1 с точностью до членов, генерирующих

пропорциональные \hbar^3 поправки, в виде

$$U(\mathbf{r}') - U(\mathbf{r}) = U\left(\mathbf{R} + \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2}\right) - U\left(\mathbf{R} - \frac{\tilde{\mathbf{r}}}{2}\right) = \frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}} \tilde{\mathbf{r}} + \dots,$$

поэтому это слагаемое, поделенное на $i\hbar$, можно представить как

$$\frac{1}{i\hbar} (U(\mathbf{r}') - U(\mathbf{r})) \langle \mathbf{r}'_1 | F_1 | \mathbf{r}_1 \rangle = \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial U(\mathbf{R}_1)}{\partial \mathbf{R}_1} \tilde{\mathbf{r}}_1 \int F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} d\mathbf{p}_1 + O(\hbar^2),$$

или, учитывая, что

$$\frac{1}{i\hbar} \tilde{\mathbf{r}}_1 e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1},$$

и сделав эту замену, а затем взяв полученный интеграл по частям, как

$$\frac{1}{i\hbar} (U(\mathbf{r}'_1) - U(\mathbf{r}_1)) \langle \mathbf{r}'_1 | F_1 | \mathbf{r}_1 \rangle = \int \frac{\partial U(\mathbf{R}_1)}{\partial \mathbf{R}_1} \frac{\partial F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1)}{\partial \mathbf{p}_1} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} d\mathbf{p}_1 + O(\hbar^2).$$

Аналогичным образом представим второе слагаемое из (γ) (переменную \mathbf{r}_2 преобразовывать нет смысла, так как по ней берется шпур),

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{v} \int d\mathbf{r}_2 (\Phi(|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2|) - \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)) \langle \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}_2 | \delta F_2 | \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle = \\ = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{v} \int d\mathbf{r}_2 \frac{\partial \Phi(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_2|)}{\partial \mathbf{R}_1} \tilde{\mathbf{r}}_1 \delta F_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{r}_2) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 + \dots = \\ = \frac{1}{v} \int \frac{\partial \Phi(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_2|)}{\partial \mathbf{R}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \delta F_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2 e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} d\mathbf{p}_1 + O(\hbar^2). \end{aligned}$$

Таким образом, в квазиклассическом пределе получаем из уравнения (γ), собрав все его части, уравнение для $\delta F_1(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta F_1(t, \mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1) + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_1} \delta F_1 - \frac{\partial U(\mathbf{R}_1)}{\partial \mathbf{R}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} F_1 = \\ = \frac{1}{v} \int \frac{\partial \Phi(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_2|)}{\partial \mathbf{R}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \delta F_2(t; \mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2, \end{aligned}$$

которое является не чем иным, как проварьированным (величины δF_1 , U и δF_2 — все одного порядка по $\delta\xi$) первым уравнением цепочки Боголюбова для кинетических функций распределения.

Чтобы сопоставить полученное уравнение для функции Грина $\langle\langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$ с каким-либо известным кинетическим уравнением (у нас не такой уж большой их выбор — это в основном кинетическое уравнение Больцмана и его модификации и уравнение Власова), выберем в качестве показательного примера кинетическое уравнение в приближении самосогласованного поля (т.е. уравнение Власова) и покажем, как физическая программа, позволившая в низшем порядке замкнуть первое из уравнений цепочки Боголюбова, формализуется по отношению к процедуре замыкания полученной цепочки уравнений для функций Грина.

Как известно (см. т. 3, гл. 5, § 5), эта программа, основанная на физическом анализе особенностей системы с кулоновским взаимодействием частиц друг с другом, приводит к оправданию простейшей (в нулевом приближении по плазменному

параметру v/r_D^3 , где r_D — дебаевский радиус экранирования) аппроксимации парной корреляционной функции: достаточно положить

$$F_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{R}_2) \mapsto F_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1; \mathbf{p}_2, \mathbf{R}_2)^{(B\lambda)} = F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1) \cdot F_1(\mathbf{p}_2, \mathbf{R}_2),$$

и первое уравнение цепочки Боголюбова превращается в нелинейное кинетическое уравнение Власова. Переведем эту аппроксимацию на язык статистических операторов, имеем

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{R}_1 + \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1}{2}, \mathbf{R}_2 + \frac{\tilde{\mathbf{r}}_2}{2} \left| F_2^{(B\lambda)} \right| \mathbf{R}_1 - \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1}{2}, \mathbf{R}_2 - \frac{\tilde{\mathbf{r}}_2}{2} \right\rangle &= \\ &= \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 F_2^{(B\lambda)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{p}_1; \mathbf{R}_2, \mathbf{p}_2) e^{i(\mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1 + \mathbf{p}_2 \tilde{\mathbf{r}}_2)} = \\ &= \int d\mathbf{p}_1 F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{R}_1) e^{i\mathbf{p}_1 \tilde{\mathbf{r}}_1} \int d\mathbf{p}_2 F_1(\mathbf{p}_2, \mathbf{R}_2) e^{i\mathbf{p}_2 \tilde{\mathbf{r}}_2} = \\ &= \left\langle \mathbf{R}_1 + \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1}{2} \left| F_1 \right| \mathbf{R}_1 - \frac{\tilde{\mathbf{r}}_1}{2} \right\rangle \left\langle \mathbf{R}_2 + \frac{\tilde{\mathbf{r}}_2}{2} \left| F_1 \right| \mathbf{R}_2 - \frac{\tilde{\mathbf{r}}_2}{2} \right\rangle. \end{aligned}$$

Учитывая, что $F_s = \langle A_s \rangle$, где оператор A_s записывается в виде соответствующего произведения Ψ -операторов, и опуская множитель v^2 , представим это расщепление в виде

$$\left\langle \overline{\Psi^+(x_1) \Psi^+(x_2) \Psi(x'_2) \Psi(x'_1)} \right\rangle^{(B\lambda)} = \langle \Psi^+(x_1) \Psi(x'_1) \rangle \langle \Psi^+(x_2) \Psi(x'_2) \rangle.$$

В этом, а также в импульсном p -представлении, в котором у нас записано уравнение для функции Грина,

$$\left\langle \overline{a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p'_2} a_{p'_1}} \right\rangle^{(B\lambda)} = \langle a_{p_1}^+ a_{p'_1} \rangle \langle a_{p_2}^+ a_{p'_2} \rangle,$$

эта аппроксимация выглядит так, будто, используя технику спариваний Блоха и Доминисиса (см. гл. 1, § 3, п. н), мы учли только один (отмеченный поверх операторов) вариант (из двух возможных) полной системы «спариваний» (напомним, что теорема о спариваниях не универсальна, она доказана только по отношению к средним, взятым по смешанным состояниям идеальной равновесной системы).

Так как в наши уравнения входит не F_2 , а вариация двухчастичного оператора δF_2 , то проварьируем последнее соотношение,

$$\delta \langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p'_2} a_{p'_1} \rangle^{(B\lambda)} = \langle a_{p_1}^+ a_{p'_1} \rangle \delta \langle a_{p_2}^+ a_{p'_2} \rangle + \delta \langle a_{p_1}^+ a_{p'_1} \rangle \langle a_{p_2}^+ a_{p'_2} \rangle,$$

воспользуемся формулой (**), связывающей вариации δF_2 и $\delta \langle a_p^+ a_{p'} \rangle$ с соответствующими функциями Грина

$$\begin{aligned} \frac{1}{v^2} \delta F_2 &= \delta \langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p'_2} a_{p'_1} \rangle = \frac{1}{v^2} \langle \langle A_2 | U \rangle \rangle_{E+i\epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} = \\ &= \left\langle \left\langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p'_2} a_{p'_1} \left| \frac{1}{V} \sum_q u(q) \rho_q^+ \right. \right\rangle \right\rangle_{E+i\epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}, \\ \delta \langle a_p^+ a_{p'} \rangle &= \left\langle \left\langle a_p^+ a_{p'} \left| \frac{1}{V} \sum_q u(q) \rho_q^+ \right. \right\rangle \right\rangle_{E+i\epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t}, \end{aligned}$$

и, соединив написанные формулы в одно выражение, возьмем вариационную производную по входящей во все слагаемые этого выражения величине $\delta\xi = u(q)/V$ при $u(q) = 0$. Тогда получим рецепт «власовского» расщепления уже для функции Грина $\langle\langle A_2 | \rho_q^+ \rangle\rangle$,

$$\langle\langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p_2'}^+ a_{p_1'}^+ | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}^{(Бл)} = \langle a_{p_1}^+ a_{p_1'}^+ \rangle \langle\langle a_{p_2}^+ a_{p_2'}^+ | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon} + \langle a_{p_2}^+ a_{p_2'}^+ \rangle \langle\langle a_{p_1}^+ a_{p_1'}^+ | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon},$$

причем фигурирующие здесь средние $\langle \dots \rangle$ рассчитываются уже для невозмущенной системы ($u(q) = 0$), поэтому отличными от нуля будут только те из них, в которых сохраняется импульс, в частности,

$$\langle a_p^+ a_{p'} \rangle = \Delta(p - p') \langle a_p^+ a_p \rangle = \Delta(p - p') n_p.$$

Переходя к рассмотрению последнего слагаемого в уравнении для функции $\langle\langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$, обратим внимание на то, что из двух слагаемых «власовского» расщепления реальный вклад дает только то, которое отмечено линиями спариваний, определяющими в каждом из слагаемых средние значения чисел заполнения n_{p+q} и n_p и сохраняющими в этой части уравнения только одно слагаемое с $q' = q$,

$$\frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \langle\langle \overline{a_{p+q}^+ \rho_{q'} a_{p+q'}} - \overline{a_{p+q-q'}^+ \rho_{q'} a_p | \rho_q^+} \rangle\rangle_{E+i\epsilon}^{(Бл)} = \frac{1}{V} \nu(q) (n_{p+q} - n_p) \langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon},$$

в то время как остальная часть этого расщепления соответствует $q' = 0$, что автоматически исключает эту возможность, так как

$$\langle \rho_0 \rangle \langle\langle a_{p+q}^+ a_p - a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon} = 0.$$

Таким образом, уравнение для функции Грина, генетически связанной с кинетическим уравнением в приближении самосогласованного поля, приобретает окончательный вид

$$(E + i\epsilon + E_{p+q} - E_p) \langle\langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon} = (n_{p+q} - n_p) \left(1 + \frac{1}{V} \nu(q) \langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon} \right).$$

Если, наконец, учесть, что

$$\sum_p \langle\langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon} = \left\langle \left\langle \sum_p a_{p+q}^+ a_p \middle| \rho_q^+ \right\rangle \right\rangle_{E+i\epsilon} = \langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon},$$

и обозначить

$$\Pi(q, E + i\epsilon) = \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E + i\epsilon + E_{p+q} - E_p}$$

(эту величину иногда называют поляризационным оператором), то решение для функции Грина типа плотность-плотность в приближении самосогласованного поля получается сразу

$$\frac{\nu(q)}{V} \langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon} = \frac{\Pi(q, E + i\epsilon)}{1 - \Pi(q, E + i\epsilon)}.$$

Это решение линеаризованного уравнения Власова в «гриновском» изображении связано со многими характеристиками системы. Функция Грина $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$ определяет спектральную плотность $J_q(\omega) = J(\rho_q^+, \rho_q; \omega)$, среднее значение $\langle \rho_q^+ \rho_q \rangle$,

парную корреляционную функцию $F_2(R)$, величину $\langle H_1 \rangle$, термодинамический потенциал $\Omega(\theta, V, \mu)$ и уравнения состояния системы, а также связана с рядом других характеристик системы, на которых мы более подробно остановимся в дальнейшем.

Аналогичное рассмотрение можно провести по отношению к бoльцмановскому варианту кинетического уравнения для газовой системы низкой плотности с короткодействующими силами взаимодействия частиц, но оно значительно усложняется и выглядит излишне перегруженным ввиду необходимости включения в это рассмотрение точного решения задачи двух тел (см. т. 3, гл. 5, § 6). Однако в случае, когда спектр собственных значений линеаризованного уравнения Больцмана (т. е. спектр обратных времен релаксации) оказывается дискретным и минимальное нетривиальное его значение $1/\tau$ приподнято над нулевым, интеграл столкновений на временах $t \lesssim \tau$ и далее вырождается в релаксационный член $-(F(t) - F_0)/\tau$, и кинетическое уравнение становится простейшим.

Не придавая особо глубокого физического смысла этому повсеместно критикуемому, но охотно используемому в приложениях упрощенному кинетическому уравнению, рассмотрим в качестве дополнительного примера всю схему предложенной в этом параграфе процедуры на уровне этого релаксационного приближения.

Итак, исходным моментом всего рассмотрения является теперь изначально замкнутое относительно одночастичного статистического оператора $F_1(t)$ уравнение Лиувилля—фон Неймана с релаксационным членом

$$\frac{\partial}{\partial t} F_1(t) - \frac{1}{i\hbar} [H + \delta H(t), F_1(t)]_- = -\frac{1}{\tau} (F(t) - F_0).$$

Полагая для простоты величину $1/\tau = \Gamma/\hbar$ не оператором (т. е. не матрицей), а соответственно подобранным числом (т. е. единичной матрицей, умноженной на величину Γ/\hbar), и считая, что отклонение $\delta F_1(t) = F_1(t) - F_0$ одночастичного оператора от его равновесного значения F_0 связано с динамическим возмущением $\delta H(t)$ рассматриваемого типа, имеем в линеаризованном варианте

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + i\Gamma \right) \delta F_1(t) = [H, \delta F_1(t)]_- + [\delta H(t), F_0]_-.$$

Таким образом, чтобы продвинуться дальше, нет необходимости повторять все длинные выкладки этого параграфа, достаточно в них положить $\Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = 0$ (или $\nu(q) = 0$) и сделать замену

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \mapsto -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + i\Gamma$$

или в энергетическом представлении $E \rightarrow E + i\Gamma$ (еще проще: $i\epsilon \rightarrow i\Gamma$, где положительная величина $\Gamma \neq 0$). Соответствующий этому уравнению его вариант (Υ) в вигнеровском приближении сразу приводит к стандартной записи классического кинетического уравнения с релаксационным членом

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta F_1(t, \mathbf{p}, \mathbf{R}) + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial \delta F_1}{\partial \mathbf{R}} - \frac{\partial U(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{\delta F_1}{\tau}$$

(оно замкнуто относительно $\delta F_1(t, \mathbf{p}, \mathbf{R})$, поэтому никакого «расщепления» не предусматривает, и мы привели его скорее всего ради самоуспокоения), а уравнение для соответствующей оператору δF_1 функции Грина приобретает вид

$$(E + i\Gamma + E_{p+q} - E_p) \langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\epsilon} = \langle a_{p+q}^+ a_{p+q} - a_p^+ a_p \rangle,$$

позволяющий сразу же выписать его решение

$$\langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\epsilon} = \frac{n_{p+q} - n_p}{E + i\Gamma + E_{p+q} - E_p},$$

а также получить выражение для функции Грина типа плотность-плотность

$$\langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\epsilon} = \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E + i\Gamma + E_{p+q} - E_p}.$$

Несмотря на то что рассмотренные нами два примера реализации общей кинетической программы относятся к совершенно разным с физической точки зрения приближениям (первый пример — это приближение самосогласованного поля, т. е. случай дальнего действия, в частности кулоновского взаимодействия частиц друг с другом; второй пример, сохраняющий элементы больцмановского подхода — это приближение низкой плотности и короткодействия, учитываемого эффективным образом при выборе параметра τ , который при самой грубой его оценке оказывается пропорциональным среднему времени свободного пробега), полученные результаты для функции Грина типа плотность-плотность оказываются в формальном отношении вполне сопоставимыми, особенно если записать власовское приближение для нее в виде разложения в бесконечный ряд по степеням фурье-образа кулоновского потенциала взаимодействия $\nu(q)$:

$$\begin{aligned} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\epsilon}^{(Вл)} &= \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E + i\epsilon + E_{p+q} - E_p} \frac{1}{1 - \Pi(q, E + i\epsilon)} = \\ &= \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E + i\epsilon + E_{p+q} - E_p} \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\nu(q) \frac{1}{V} \sum_q \frac{n_{p+q} - n_p}{E + i\epsilon + E_{p+q} - E_p} \right)^n \right). \end{aligned}$$

Заметим, что если в этой формуле выключить взаимодействие частиц, обеспечивающее существование в системе самосогласованного поля, т. е. положить $\nu(q) = 0$, то мы получим функцию Грина для уравнения с релаксационным членом с тем фиктивным ϵ -затуханием, которое вводится в изначально обратимое во времени бесстолкновительное уравнение Власова, с тем чтобы сделать его необратимым и получить затем с его помощью затухающие решения для плазменных колебаний и т. п. (см. т. 3, гл. 5, § 5).

§ 4. Рассеяние частиц на статистических системах

Соблюдая традиции теоретического рассмотрения означенной в заглавии проблемы, будем полагать, что все свойства падающего на равновесную статистическую систему разреженного пучка частиц или излучения нам известны и нами же произвольно регулируемы.

Будем считать также, что, невзирая на технические трудности эксперимента, нам стали известны во всех подробностях все свойства рассеянного на системе пучка частиц или излучения.

Далее, ограничимся случаем, когда падающий на систему поток частиц или излучения не поглощается системой, а рассеивается на ней в основном неупругим образом.

Наконец, мы не ставили своей задачей изложение общей теории рассеяния. Рассмотрение этого процесса, связанного с возмущением системы направленными

на нее потоками частиц или излучения нам нужно для того, чтобы выявить на основе анализа дифференциального сечения рассеяния такую важную микроскопическую характеристику системы, как спектральная плотность $J_q(\omega)$ (т. е., грубо говоря, «измерить» ее), с которой, как мы уже убедились в предыдущих параграфах, связаны многие макроскопические и микроскопические характеристики статистической системы.

Не претендуя на решение общей проблемы, мы ограничимся рассмотрением двух характерных частных случаев: первый — когда дебройлевская длина волны налетающих на систему частиц мала по сравнению со средним расстоянием между частицами системы, и противоположный ему — когда длина волны падающего излучения значительно больше этого расстояния. В первом случае налетающая частица взаимодействует порознь со всеми частицами системы, причем потенциал этого взаимодействия полагается известным (или определенным в отдельном эксперименте по рассеянию одной падающей частицы на отдельной частице из нашей системы). Во втором случае налетающая волна как бы не чувствует отдельных частиц системы, и рассеяние происходит сразу на большом их числе, в частности на колебаниях плотности, неизбежно присутствующих в статистических системах, и т. п.

а) Рассеяние быстрых частиц

Рассматривая самую простую реализацию такого рассеяния, предположим, что разреженный монохроматический пучок частиц с импульсом \mathbf{p}_0 падает на однокомпонентную равновесную систему, причем взаимодействие каждой из этих частиц с отдельной частицей системы определяется скалярным потенциалом $u(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|)$, зависящим только от межатомного расстояния. Представляя его в виде разложения Фурье:

$$u(|\mathbf{r}|) = \frac{1}{V} \sum_q U_q e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}}, \quad U_q = \int u(|\mathbf{r}|) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}} d\mathbf{r},$$

запишем потенциал взаимодействия налетающей частицы со всей статистической системой

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N} u(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|) = \frac{1}{V} \sum_q U_q e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}} \sum_{1 \leq i \leq N} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}_i}.$$

Так как последняя сумма в этом выражении для $U(\mathbf{r})$ представляет собой фурье-образ плотности числа частиц системы

$$\rho_q = \int \rho(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \int d\mathbf{r} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}} \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \sum_{1 \leq i \leq N} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}_i},$$

то возмущающий систему потенциал можно представить в виде

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_q U_q e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{r}} \rho_q.$$

Располагая возможностью выбора условий эксперимента в наиболее приемлемом для наших целей варианте, рассмотрим тот из них, который вполне адекватно описывается борновским приближением (отсюда и название «рассеяние быстрых частиц»), определяемом квадратом матричного элемента перехода всей рассматриваемой системы из начального состояния $|\mathbf{p}_0, n\rangle$ (свободная частица в состоянии с импульсом \mathbf{p}_0 , статистическая система в чистом квантово-механическом состоянии n , входящем в состав ее равновесного смешанного состояния) в конечное $|\mathbf{p}, m\rangle$

(вылетевшая и уже свободная частица в состоянии с импульсом \mathbf{p} , система — в состоянии $|m\rangle$). Так как нас интересует только вероятность перехода налетающей частицы с импульсом \mathbf{p}_0 в состояние с импульсами в интервале значений $(\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$ (именно эта величина в какой-то мере фиксируется экспериментально), то необходимо учесть, что начальное состояние системы $|n\rangle$ входит в состав смешанного равновесного состояния с гиббсовским фактором w_n (система в термостате). Поэтому, умножив борновскую вероятность перехода $|\mathbf{p}_0, n\rangle \rightarrow |\mathbf{p}, m\rangle$ на вероятность начального состояния системы w_n , а затем просуммировав по всем n , а также по всем возможным конечным состояниям системы $|m\rangle$, и обозначив в аргументе автоматически возникающей во втором порядке временной квантово-механической теории возмущений δ -функции, обеспечивающей закон сохранения энергии в переходе $|\mathbf{p}_0, n\rangle \rightarrow |\mathbf{p}, m\rangle$, изменение энергии рассеивающейся частицы как

$$E = \frac{p_0^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}$$

(тоже экспериментально измеряемая величина), получим для интересующей нас вероятности перехода исходное выражение

$$w(\mathbf{p}_0 \rightarrow (\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})) = \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} \sum_m \sum_n w_n |\langle \mathbf{p}_0, n | U(\mathbf{r}) | \mathbf{p}, m \rangle|^2 \delta(E_m - E_n - E) \right\} d\mathbf{p}.$$

Так как до и после «соударения» со статистической системой возмущающая ее частица является свободной, то

$$\langle \mathbf{p}_0, n | = \langle n | \cdot \varphi_{\mathbf{p}_0}^*(\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad | \mathbf{p}, m \rangle = | m \rangle \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}),$$

где $|n\rangle$ и $|m\rangle$ — собственные функции оператора Гамильтона, характеризующего статистическую систему, а $\varphi_{\mathbf{p}_0}^*(\mathbf{r})$ и $\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ — плоские волны вне системы и поэтому нормированные в бесконечном объеме,

$$\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \quad \varphi_{\mathbf{p}_0}^*(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}_0\mathbf{r}}.$$

Поэтому, подставляя в матричный элемент перехода $|\mathbf{p}_0, n\rangle \rightarrow |\mathbf{p}, m\rangle$ выражение для оператора $U(\mathbf{r})$, получаем

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_0, n | U(\mathbf{r}) | \mathbf{p}, m \rangle &= \frac{1}{V} \sum_q U_q \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0-\mathbf{q})\mathbf{r}} \langle n | \rho_q | m \rangle = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{q} U_q \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0 - \mathbf{q}) \langle n | \rho_q | m \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} U_q \langle n | \rho_q | m \rangle \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{p}-\mathbf{p}_0}, \end{aligned}$$

т. е., в соответствии со схемой, приведенной на рис. 16, величина \mathbf{q} — это импульс, передаваемый всей системой рассеиваемой ею частице.

Далее, так как величины E и \mathbf{q} измеряются экспериментально, несколько преобразуем исходное выражение для вероятности изменения импульса $(\mathbf{p}_0) \rightarrow (\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p})$ падающей на систему частицы. Во-первых, в дифференциальной величине

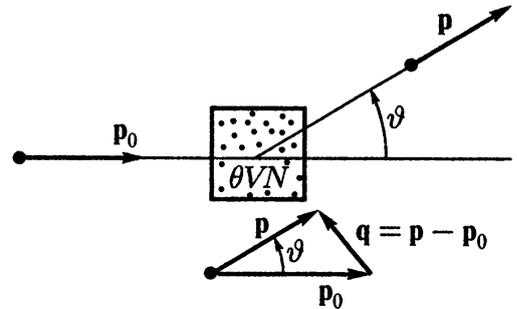


Рис. 16. Схема процесса рассеяния частицы на статистической системе в целом и соотношение импульсов частицы до и после ее рассеяния, \mathbf{p}_0 и \mathbf{p} , с сообщенным ей рассеивающей системой импульсом передачи \mathbf{q}

$d\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z$ выделим угловую часть, а модуль $|\mathbf{p}| = p$ выразим через измеряемое изменение энергии частицы E ,

$$d\mathbf{p} \mapsto \sin \vartheta d\vartheta d\varphi p^2 dp = \frac{p(E)}{m} d\Omega dE,$$

где $p(E) = |\mathbf{p}| = p_0 \sqrt{1 - 2mE/p_0^2}$.

Во-вторых, чтобы получить выражение для сечения рассеяния, отнесем рассматриваемую вероятность к единице падающего на систему потока частиц, описываемых плоскими волнами, $\varphi_{p_0}(\mathbf{r})$,

$$j_{p_0} = |j_{p_0}| = \left| \frac{\hbar}{i} \frac{1}{2m} (\varphi_{p_0}^*(\mathbf{r}) \nabla \varphi_{p_0}(\mathbf{r}) - \varphi_{p_0}(\mathbf{r}) \nabla \varphi_{p_0}^*(\mathbf{r})) \right| = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p_0}{m}.$$

Тогда, учитывая, что

$$\langle n | \rho_q | m \rangle^* = \langle m | \rho_q^+ | n \rangle,$$

и собирая все множители вместе, получаем для дифференциального сечения рассеяния в телесный угол $d\Omega$ с изменением энергии налетающей частицы в интервале $(E, E + dE)$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi\hbar)^6} \frac{p(E)}{p_0} |U_q|^2 \sum_{nm} w_n \langle n | \rho_q | m \rangle \langle m | \rho_q^+ | n \rangle \delta(E_m - E_n - E) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p(E)}{p_0} |U_q|^2 J(\rho_q, \rho_q^+; E), \end{aligned}$$

где мы учли данное в гл. 2 определение спектральной плотности $J(B, A; \omega)$.

Подведем итоги.

1. Мы показали, что, располагая всеми данными, касающимися рассеянного пучка налетающих на систему частиц (что возможно, конечно, лишь в идеале) и зная закон их взаимодействия с отдельными частицами системы (т. е. U_q), мы тем самым получаем возможность определить (или, как говорят, измерить) спектральную плотность $J_q(E)$ типа $\rho_q - \rho_q^+$, которая, как мы уже упоминали в конце предыдущего параграфа, связана со многими характеристиками системы.
2. Следует заметить, что помимо этих свойств мы можем, располагая величиной $J_q(E)$, определить на плоскости $(q-E)$ линию $E = E(q)$, соответствующую для каждого q максимальному значению по E спектральной плотности $J_q(E)$, т. е. линию резонансов величины $J_q(E)$ на этой плоскости, соответствующую так называемой дисперсионной зависимости энергии возбужденного состояния системы (квазичастицы или собственного ее колебания) от импульса q (соответственно ширина этих максимумов определит зависимость от q затухания этих возбуждений).
3. Весьма примечательно, что в полученной формуле для дифференциального сечения рассеяния свойства налетающих на систему частиц полностью отделились от статистических свойств системы. Поэтому для уточнения измеряемой спектральной плотности $J_q(E)$ или расширения области значений ее аргументов можно, варьируя условия эксперимента, использовать пучки разных частиц с разным взаимодействием с частицами системы, характеризуемым функцией U_q .

4. Располагая возможностью регулировать условия эксперимента, мы можем реализовать случай, когда

$$\frac{p_0^2}{(2m)} \gg E = \frac{(p^2 - p_0^2)}{(2m)},$$

т. е. энергия налетающей частицы значительно больше «неупругой» реакции рассеивающей системы: это случай, когда характеризующая систему спектральная плотность $J_q(E)$

на уровне $E \sim p_0^2/(2m)$ практически равна нулю (см. рис. 17), и никаких «резонансов» в системе не возбуждается — рассеяние частиц становится упругим, т. е. $|p| = |p_0|$, $p(E)/p_0 = 1$, а величина переданного импульса q определяется углом рассеяния ϑ , $q = 2p_0 \sin \vartheta/2$.

Тогда, проинтегрировав полученное выражение для сечения по E , получаем, освобождая экспериментатора от дополнительных хлопот, уже дифференциальное сечение только углового рассеяния,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} |U_q|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE J(\rho_q, \rho_q^+; E) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} |U_q|^2 \langle \rho_q \rho_q^+ \rangle.$$

Так как величина $v(\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle / N - 1)$ связана фурье-преобразованием с $(F_2(R) - 1)$, то, располагая всеми данными, касающимися углового рассеяния на статистической системе, можно говорить об экспериментальном определении парной корреляционной функции $F_2(R)$, а также всех связанных с величиной $\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle$ термодинамических характеристик системы.

5. Полученные (достаточно простые на вид) результаты относятся к самой простой модели взаимодействия падающих на систему частиц с частицами системы, пригодной в известной степени для случая рассеяния на системе монохроматического пучка нейтронов. В более сложных случаях, естественно, возникают и более сложные формы реакции системы на подобное внешнее ее возмущение.

б) Рассеяние электромагнитного излучения

Этот случай в постановочной своей части во многом подобен рассмотренному в предыдущем пункте, однако он все же заметно отличается от него целым рядом характерных особенностей.

Прежде всего, экспериментальная техника традиционной оптики располагает установками с очень высокой разрешающей способностью (чего нельзя сказать о соответствующих ядерных установках), что позволяет получать результаты в отношении спектральных характеристик с высокой степенью достоверности.

Далее, частота падающего на систему электромагнитного излучения ω_0 оказывается на много порядков больше тех резонансных частот, которые характерны для исследуемой системы, так что сдвиг частоты рассеянного пучка электромагнитных волн оказывается относительно очень малым,

$$\omega_{\text{расс}} = \omega = \omega_0 + \Delta\omega, \quad \Delta\omega \ll \omega_0,$$

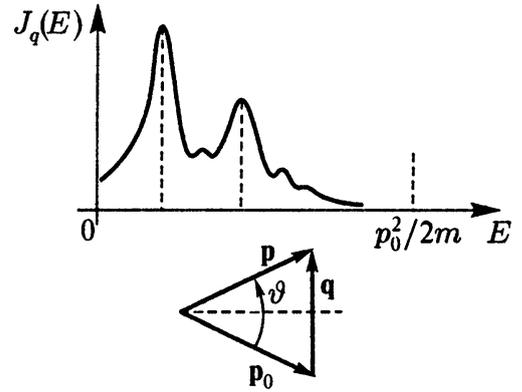


Рис. 17. Частный случай, когда энергия падающей на систему частицы значительно превышает энергию резонансных частот системы, ее рассеяние становится упругим и векторы p_0 , p и q образуют равнобедренный треугольник с углом ϑ при вершине и основанием $q = 2p_0 \sin \vartheta/2$

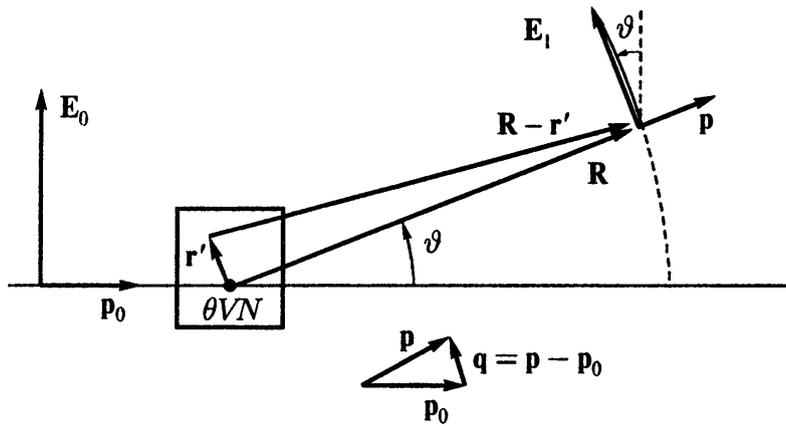


Рис. 18. Схема процесса рассеяния на статистической системе монохроматического электромагнитного излучения на уровне волновой зоны

и поэтому модуль импульса рассеянного фотона $|\mathbf{p}| = p = |\mathbf{p}_0 + \mathbf{q}|$ (см. общую схему процесса рассеяния на рис. 18) практически сохраняет свою первоначальную величину p_0 ,

$$\frac{p}{p_0} = \frac{\omega}{\omega_0} = 1 + \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \cong 1.$$

Характерной особенностью рассматриваемого случая является то, что, несмотря на высокую частоту ω_0 , длина волны падающего излучения, измеряемая тысячами ангстрем, значительно превосходит среднее расстояние между частицами $a = (V/N)^{1/3} \ll \lambda$, что позволяет пренебречь рассеянием электромагнитных волн на отдельных частицах системы и считать, что это рассеяние происходит на среде, характеризуемой диэлектрической и магнитной проницаемостями ϵ и μ и проводимостью σ , и определяется классической схемой электродинамики Максвелла.

В отношении же электромагнитных свойств системы мы будем полагать, что она по отношению к электромагнитному излучению является прозрачной, т. е. ее проводимость $\sigma = 0$, что для частот порядка ω_0 динамическая магнитная проницаемость системы $\mu = 1$, а динамическая диэлектрическая проницаемость ϵ , являясь функцией плотности числа частиц системы ρ , может быть представлена в виде

$$\epsilon(\rho) = \epsilon_0 + \frac{\partial \epsilon_0}{\partial \rho_0} (\rho - \rho_0) + \dots = \epsilon_0 + \epsilon_1 + \dots,$$

где

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i),$$

а $\rho_0 = N/V$ — невозмущенная средняя плотность числа частиц в системе и $\epsilon_0 = \epsilon(\rho_0)$.

Наконец, в духе всего нашего подхода, связанного с учетом только линейной реакции системы, линейных характеристических уравнений электродинамики и т. д., мы и при исследовании электродинамической части проблемы рассеяния будем придерживаться того же приближения.

Переходя к непосредственному решению сформулированной задачи, запишем уравнения Максвелла, которые в отсутствии объемных зарядов и токов имеют вид

$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \\ \text{div } \epsilon \mathbf{E} = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} \text{rot } \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \epsilon \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \text{div } \mathbf{H} = 0. \end{cases}$$

Прежде всего, исключим из этих уравнений «свободного» электромагнитного поля вектор \mathbf{H} . Подействовав операцией rot на первое уравнение, подставим в его правую часть $\text{rot } \mathbf{H}$ из второго уравнения, а в левой его части представим двойную дифференциальную операцию rot rot как

$$[\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}]] = -\nabla^2 \mathbf{E} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}).$$

Тогда исходная система уравнений для вектора поля \mathbf{E} приобретет вид

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{E} - \text{grad div } \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \epsilon \mathbf{E}, \\ \text{div } \epsilon \mathbf{E} = 0. \end{cases}$$

Положим, что падающее на систему излучение представляет собой плоскополяризованную волну

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i p_0 r - \frac{i}{\hbar} \omega_0 t},$$

характеризуемую спектральной плотностью

$$J_{p_0}(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} |\mathbf{E}_0| e^{-\frac{i}{\hbar} \omega_0 t} = E_0 \delta(\omega - \omega_0)$$

со спектральной амплитудой падающего пучка E_0 .

Интересуясь не основной долей этого излучения, проходящего через систему по прямой, а слабым его рассеянием на конечные углы ϑ , т. е. случаем $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}_0$, положим

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1 + \dots, \quad \epsilon = \epsilon_0 + \epsilon_1 + \dots,$$

где $|\mathbf{E}_1| \ll E_0$ и $\epsilon_1 \ll \epsilon_0$, и удержим в уравнениях для \mathbf{E} помимо нулевого только первый порядок по \mathbf{E}_1 и ϵ_1 ,

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{E}_0 + \nabla^2 \mathbf{E}_1 - \text{grad div } \mathbf{E}_0 - \text{grad div } \mathbf{E}_1 = \frac{\epsilon_0}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_0}{\partial t^2} + \frac{\epsilon_0}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_1}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \epsilon_1 \mathbf{E}_0, \\ \epsilon_0 \text{ div } \mathbf{E}_0 + \text{div } \epsilon_1 \mathbf{E}_0 + \epsilon_0 \text{ div } \mathbf{E}_1 = 0. \end{cases}$$

Уравнения нулевого порядка

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{E}_0 - \frac{\epsilon_0}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_0}{\partial t^2} = 0, \\ \epsilon_0 \text{ div } \mathbf{E}_0 = 0 \end{cases}$$

практически ничего нового не дают, кроме очевидного соотношения

$$\omega_0 = p_0 \frac{c}{\sqrt{\epsilon_0}} = p_0 \tilde{c},$$

где \tilde{c} — скорость распространения электромагнитной волны в рассеивающей ее статистической системе.

Чтобы не переписывать уравнение первого порядка дважды, положим в левой части приближенного уравнения $\text{div } \mathbf{E}_0 = 0$, а $\text{div } \mathbf{E}_1$ сразу выразим с помощью второго уравнения через $\text{div } \epsilon_1 \mathbf{E}_0$. Тогда уравнение для \mathbf{E}_1 примет вид неоднородного (в отличие от уравнения для \mathbf{E}_0) уравнения гиперболического типа с известной

(т. е. выражающейся через известное поле \mathbf{E}_0 и величину $\epsilon_1 = \epsilon - \epsilon_0$) правой частью, дополненного условием на $\text{div } \mathbf{E}_1$,

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{E}_1 - \frac{\epsilon_0}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_1}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \epsilon_1 \mathbf{E}_0 - \frac{1}{\epsilon_0} \text{grad div } \epsilon_1 \mathbf{E}_0, \\ \text{div } \mathbf{E}_1 = -\frac{1}{\epsilon_0} \text{div } \epsilon_1 \mathbf{E}_0. \end{cases}$$

Следуя известным стандартным формулам, можно сразу записать решение этого уравнения в виде запаздывающей расходящейся волны

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1(\mathbf{R}, t) = \\ = -\frac{1}{4\pi} \int_{(V)} d\mathbf{r}' \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|} \left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} \epsilon_1(\mathbf{r}', t') \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', t') - \frac{1}{\epsilon_0} \text{grad div } \epsilon_1(\mathbf{r}', t') \mathbf{E}_0(\mathbf{r}', t') \right\}_{t'=t-\frac{|\mathbf{R}-\mathbf{r}'|}{c}}. \end{aligned}$$

Это решение, полученное только в первом порядке и связывающее величину рассеянного поля \mathbf{E}_1 с возмущением диэлектрической проницаемости системы ϵ_1 , имеет общий характер и выглядит достаточно сложно. Конкретизация и учет тех условий, которые характерны для рассматриваемой задачи рассеяния, упростит это решение настолько, что оно сделается вполне пригодным для дальнейшего его сопоставления с реальным экспериментом.

Осуществляя эти упрощения поэтапно, заметим сразу, что, фиксируя рассеянное излучение в волновой зоне, т. е. на расстояниях $R \gg V^{1/3}$, значительно превышающих размер статистической системы, будем иметь для всех значений \mathbf{r}' внутри области интегрирования $|\mathbf{r}'| \ll R$, и поэтому можно вынести величину

$$\frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|} \cong \frac{1}{R}$$

за знак интеграла по области V .

Интересуясь рассеянием электромагнитных волн собственно статистической системой, а не ее конкретными границами, свойства и геометрия которых после осуществления обязательной для нас предельной статистической процедуры выпадают из рассмотрения и оказываются несущественными, и замечая, что второе слагаемое, стоящее в фигурных скобках в интегральном выражении для $\mathbf{E}_1(\mathbf{R}, t)$, имеет структуру

$$\int_a^b dx' \frac{\partial}{\partial x'} \Phi(x') = \Phi(x') \Big|_a^b,$$

где a и b — условные граничные значения компоненты вектора \mathbf{r}' , связанные с внешней формой системы, занимающей область V , мы можем «попросить» экспериментатора создать такие условия фиксации рассеянного излучения, которые позволили бы исключить «блики», создаваемые границами системы, и на этом основании благополучно опустить это второе слагаемое.

Далее, аргумент t' , фигурирующий в фигурных скобках, включает величину $|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|$, которую в рассматриваемом случае $R \gg |\mathbf{r}'|$ можно упростить, используя теорему косинусов и то, что единичный вектор в направлении распространения рассеянной волны \mathbf{R}/R можно представить как \mathbf{p}/p ,

$$|\mathbf{R} - \mathbf{r}'| = \sqrt{R^2 - 2Rr' + (r')^2} \cong R - \frac{Rr'}{R} = R - \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}'}{p} = R - \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}'}{p_0} \left(1 - \frac{\Delta\omega}{\omega_0}\right) \cong R - \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}'}{p_0}.$$

Поэтому, учитывая, что $\tilde{c} = \sqrt{\epsilon_0} c = \omega_0/p_0$, можно представить временной аргумент вектора $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}', t')$ в виде

$$-\frac{i}{\hbar}\omega_0 t' = -\frac{i}{\hbar}\omega_0 \left(t - \frac{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|}{\tilde{c}} \right) \cong -\frac{i}{\hbar}\omega_0 \left(t - \frac{1}{\tilde{c}} \left(R - \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}'}{p_0} \right) \right) = -\frac{i}{\hbar}\omega_0 t + \frac{i}{\hbar}p_0 R - \frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}',$$

а сам вектор $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}', t')$ как

$$\mathbf{E}_0 \left(\mathbf{r}', t - \frac{1}{\tilde{c}} |\mathbf{R} - \mathbf{r}'| \right) \cong \mathbf{E}_0 e^{-\frac{i}{\hbar}\omega_0 t} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}p_0 R} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{r}'},$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0$ — знакомый нам импульс передачи, что позволяет вынести за знак интеграла по $d\mathbf{r}'$ не только недостающий элемент расходящейся сферической волны $e^{\frac{i}{\hbar}p_0 R}$, но и амплитудное значение вектора \mathbf{E}_0 .

Наконец, чтобы избавиться от векторных величин, заметим, что если умножить $\mathbf{E}_1(R, t)$ скалярно снова на \mathbf{E}_1 , то в правой части появится комбинация $(\mathbf{E}_1 \mathbf{E}_0) = |\mathbf{E}_1| \cdot |\mathbf{E}_0| \cos \vartheta$, а в левой останется $(\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_1) = |\mathbf{E}_1|^2$, поэтому, сократив на $|\mathbf{E}_1|$, получим более компактное выражение для модуля рассеянной волны $|\mathbf{E}_1|$:

$$|\mathbf{E}_1(r, t)| = \frac{|\mathbf{E}_0| \cos \vartheta}{4\pi c^2} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}p_0 R}}{R} \int_{(V)} d\mathbf{r}' e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{r}'} (-1) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left\{ \epsilon_1 \left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{R} - \mathbf{r}'|}{\tilde{c}} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\omega_0 t} \right\}.$$

Перейдем теперь к рассмотрению временной зависимости, оставшейся под знаком интеграла. Так как частота падающего на систему излучения ω_0 значительно превосходит характеризующие ее резонансные частоты, $\omega_0 \gg \omega_{\text{рез}} \sim \Delta\omega$, которые входят во временную зависимость ϵ_1 , то основной вклад от операции $-\partial^2/\partial t^2$, равный ω_0^2/\hbar^2 , даст экспонента $e^{-\frac{i}{\hbar}\omega_0 t}$, в то время как дифференцирование ϵ_1 приведет к появлению уже не раз отброшенных нами частотных поправок. Оставшийся же интеграл по $d\mathbf{r}'$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} \int_{(V)} d\mathbf{r}' e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{r}'} \epsilon_1(\mathbf{r}', t') &= \int_{(V)} d\mathbf{r}' e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{r}'} \frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \left(\sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) - \rho_0 \right) = \\ &= \frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \left(\sum_{1 \leq i \leq N} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{r}_i} - \rho_0 \Delta(\mathbf{q})V \right) = \frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \rho_{-\mathbf{q}}(t'), \end{aligned}$$

где мы, договорившись заранее считать $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0 \neq 0$, опустили последнее слагаемое, включающее $\Delta(\mathbf{q})$.

Чтобы записать ответ для $|\mathbf{E}_1|$ сразу в частотном (или, что то же, энергетическом) представлении, умножим $E_1(R, t)$ на $e^{\frac{i}{\hbar}\omega t}/(2\pi\hbar)^3$ и проинтегрируем по t . При этом вместо формальной ϵ -процедуры (т. е. дополняя фурье-преобразование множителем $e^{-\epsilon|t|}$ с последующей процедурой $\epsilon \rightarrow 0$) воспользуемся более наглядным (и более традиционным в приложениях), но в конце концов эквивалентным способом определения этого преобразования, именно, будем интегрировать по t в пределах $-T/2 < t < T/2$ с последующим переходом к пределу при $T \rightarrow \infty$.

Тогда, опуская ненужный уже знак модуля и обозначая $\omega - \omega_0 = \Delta\omega = E$, получим

$$\begin{aligned} E_1(R; \mathbf{q}, E) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i\hbar\omega t} E_1(R, t) = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{E_0\omega_0^2 \cos\vartheta}{4\pi c^2 \hbar^2} \frac{e^{i\hbar p_0 R}}{R} \frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \int_{-T/2}^{T/2} dt e^{i\hbar E t} \rho_{-\mathbf{q}} \left(t - \frac{R}{c} \right). \end{aligned}$$

Определим теперь относительную энергетическую интенсивность рассеянного в направлении $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \mathbf{q}$ равновесной системой падающего на нее излучения (именно эту интенсивность и измеряют экспериментально) как среднее значение

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \frac{\langle E_1^*(R; \mathbf{q}, E) E_1(R; \mathbf{q}, E) \rangle}{E_0^2}.$$

Так как в элементе телесного угла $d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$ на расстоянии R помещается площадка $R^2 d\Omega$, то, записывая сразу величину сечения этого рассеяния, получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE d\Omega} &= \frac{\omega_0^4 \cos^2\vartheta}{64\pi^4 c^4 \hbar^6} \left(\frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \right)^2 \times \\ &\times \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \iint_{-T/2}^{T/2} dt_1 dt_2 e^{i\hbar E(t_2 - t_1)} \left\langle \rho_{\mathbf{q}} \left(t_1 - \frac{R}{c} \right) \rho_{\mathbf{q}}^+ \left(t_2 - \frac{R}{c} \right) \right\rangle. \end{aligned}$$

Если учесть, что функция, стоящая под знаком двойного интеграла, зависит только от разности временных аргументов $t_2 - t_1 = t$, и, оставив интеграл по t , проинтегрировать в пределах $(-T/2, T/2)$ по t_1 , то, перейдя к пределу $T \rightarrow \infty$, получим для дифференциального сечения

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dE d\Omega} &= \frac{\omega_0^4 \cos^2\vartheta}{32\pi^3 c^4 \hbar^5} \left(\frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \right)^2 \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\hbar E t} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^+(t) \rangle = \\ &= \frac{\omega_0^4 \cos^2\vartheta}{32\pi^3 c^4 \hbar^5} \left(\frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \right)^2 J(\rho_{\mathbf{q}}, \rho_{\mathbf{q}}^+; E), \end{aligned}$$

где $J(\rho_{\mathbf{q}}, \rho_{\mathbf{q}}^+; E) = J_{\mathbf{q}}(E)$ — знакомая нам спектральная плотность типа $(\rho_{\mathbf{q}} - \rho_{\mathbf{q}}^+)$. Проинтегрировав этот результат по E , мы получим уже дифференциальное сечение углового рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega_0^4 \cos^2\vartheta}{32\pi^3 c^4 \hbar^5} \left(\frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \right)^2 \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^+ \rangle.$$

Полученные формулы для дифференциальных сечений в отношении их зависимости от $J_{\mathbf{q}}(E)$ и $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^+ \rangle$ совершенно подобны тем, которые были подробно прокомментированы в п. а) этого параграфа. Поэтому, не повторяя всего обсуждения, остановимся на связи полученных результатов с флуктуациями плотности числа частиц в равновесной статистической системе.

Так как величина $(F_2(R) - 1)/v$, связанная фурье-преобразованием с комбинацией $(\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle / N - 1)$, отлична от нуля в области $R < R_{\text{корр}}$, а длина волны падающего на систему излучения $\lambda = 2\pi\hbar/p$ значительно превышает величину корреляционного радиуса $R_{\text{корр}}$, то

$$\frac{qR}{\hbar} = \frac{Rq}{\hbar} \sin \frac{\vartheta}{2} = \frac{R}{\hbar} 2p \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 4\pi \frac{R}{\lambda} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} < \frac{4\pi R}{\lambda} < \frac{4\pi R_{\text{корр}}}{\lambda} \ll 1,$$

и мы получаем

$$\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle = N \left(1 + \frac{1}{v} \int (F_2(R) - 1) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} d\mathbf{R} \right) \cong N \left(1 + \frac{1}{v} \int (F_2(R) - 1) d\mathbf{R} \right) = V \overline{(\Delta n)^2},$$

где $\overline{(\Delta n)^2}$ — дисперсия плотности числа частиц в статистической равновесной системе (см. т. 3, гл. 1, § 2), поэтому для ожидаемой связи сечения рассеяния с флуктуациями плотности получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = V \frac{\omega_0^4 \cos^2 \vartheta}{32\pi^3 c^4 \hbar^5} \left(\frac{\partial \epsilon_0(\rho_0)}{\partial \rho_0} \right)^2 \overline{(\Delta n)^2}.$$

§ 5. Правило суммы для спектральной плотности $J_q(\omega)$

Под термином «правила сумм» обычно подразумевают интегральные соотношения, представляющие собой свертку, в которую основным элементом входит спектральная плотность или какая-либо другая характеризующая систему, но непосредственно не наблюдаемая величина, которые при достаточно общих предположениях оказываются связанными с какими-либо важными наблюдаемыми характеристиками системы. Собственно говоря, «правил» в русском понимании этого слова эти соотношения не содержат, так что употребление самого термина, являющегося буквальной калькой с английского, можно отнести к издержкам англомании.

В данном параграфе мы остановимся на, пожалуй, одном из самых эффективных относящихся к статистическим системам подобных соотношений, из которого можно будет сделать определенные физические выводы.

Рассмотрим интеграл

$$I(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\rho_q, \rho_q^+; \omega) f(\omega),$$

где знакомая нам спектральная плотность $J(\rho_q, \rho_q^+; \omega)$ характеризует систему, определяемую гамильтонианом

$$H = H_0 + H_1 = \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \rho_q \rho_q^+ + \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q).$$

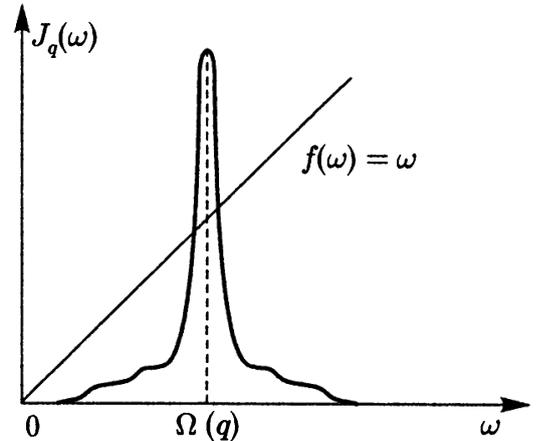


Рис. 19. Структура подынтегрального выражения, определяющего величину $I(q)$, в случае, когда $f(\omega) = \omega$, а спектральная плотность $J(\omega)$ содержит только один хорошо сформированный δ -образный максимум

Так как эта система пространственно однородна, то $I(\mathbf{q}) = I(-\mathbf{q}) = I(q)$, где $q = |\mathbf{q}|$. Если сделать самый простой выбор функции $f(\omega)$, именно, $f_1(\omega) = 1$ и $f_2(\omega) = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega t}$, то соответствующие «правила сумм», $I_1(q) = \langle \rho_q \rho_q^+ \rangle$ и $I_2(q) = \langle \rho_q \rho_q(t) \rangle$, ничего нового для нас содержать не будут (хотя первое из них при необходимости можно использовать как своеобразную нормировку). Ситуация существенно меняется, когда $f(\omega) = \omega$, особенно в том случае, когда спектральная плотность $J_q(\omega)$ имеет один изолированный максимум типа слегка размазанной δ -функции (см. рис. 19).

Исследуем эту возможность подробнее. В соответствии со свойствами спектральной плотности (см. гл. 2) и оператора ρ_q имеем,

$$\omega J(\rho_q, \rho_q^+; \omega) = J([\rho_q, H]_-, \rho_q^+; \omega),$$

$$\omega J(\rho_q^+, \rho_q; \omega) = \omega J(\rho_{-q}, \rho_{-q}^+; \omega) = J(\rho_q^+, [H, \rho_q]_-; \omega) = -J(\rho_q^+, [\rho_q, H]_-; \omega).$$

Используя симметрию интеграла $I(\mathbf{q}) = I(-\mathbf{q})$, можем представить его в виде

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega J(\rho_q, \rho_q^+; \omega) d\omega &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (\omega J(\rho_q, \rho_q^+; \omega) + \omega J(\rho_{-q}, \rho_{-q}^+; \omega)) d\omega = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (J([\rho_q, H]_-, \rho_q^+; \omega) - J(\rho_q^+, [\rho_q, H]_-; \omega)) d\omega = \\ &= \frac{1}{2} (\langle [\rho_q, H]_- \rho_q^+ \rangle - \langle \rho_q^+ [\rho_q, H]_- \rangle) = \frac{1}{2} \langle [[\rho_q, H]_-, \rho_q^+]_- \rangle. \end{aligned}$$

Переходя к расчету коммутаторов, заметим, что операторы ρ_q коммутируют друг с другом, поэтому $[\rho_q, H_1]_- = 0$ и

$$\begin{aligned} [\rho_q, H]_- &= [\rho_q, H_0]_- = \sum_{p'} E_{p'} \sum_p (a_{p+q}^+ a_p a_{p'}^+ a_{p'} - a_{p'}^+ a_{p'} a_{p+q}^+ a_p) = \\ &= \sum_p (E_p - E_{p+q}) a_{p+q}^+ a_p. \end{aligned}$$

Второй, внешний коммутатор несколько сложнее,

$$\begin{aligned} [[\rho_q, H]_-, \rho_q^+]_- &= \sum_{pp'} (E_p - E_{p+q}) (a_{p+q}^+ a_p a_{p'}^+ a_{p'} - a_{p'}^+ a_{p'} a_{p+q}^+ a_p) = \\ &= \sum_p (E_p - E_{p+q}) (a_{p+q}^+ a_{p+q} - a_p^+ a_p). \end{aligned}$$

Если в первом слагаемом последней суммы, содержащем $a_{p+q}^+ a_{p+q}$, сделать замену индекса суммирования, $p+q = p' \rightarrow p$, и подставить явные выражения для E_p и $E_{p\pm q}$, то получим ответ, вообще не содержащий сведений о характере взаимодействия частиц системы друг с другом (так как полностью выпадает $\nu(q)$),

$$[[\rho_q, H]_-, \rho_q^+]_- = \sum_p \left(\frac{(p-q)^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} + \frac{(p+q)^2}{2m} \right) a_p^+ a_p = 2 \sum_p \frac{q^2}{2m} a_p^+ a_p = 2 \frac{q^2}{2m} N,$$

«департаментам»: в задачу статистической механики входит расчет на основе микроскопической теории уравнений состояния системы, т. е. величин ϵ , μ и σ , а в задачу электродинамики — решение своими математическими методами системы дифференциальных уравнений Максвелла, дополненных материальными уравнениями, граничными и начальными условиями. Естественно, что в наши непосредственные «полномочия» входит только первый, так сказать подготовительный, этап этих общих исследований.

Так как величины ϵ , μ и σ проявляются в результате электродинамического воздействия на систему полями \mathbf{E} и \mathbf{H} , причем в традиционном для электродинамики линейном приближении, когда это воздействие считается слабым, эти величины не зависят от напряженностей полей \mathbf{E} и \mathbf{H} и реакция системы на внешнее возмущение, как мы выяснили в § 2 этой главы, выражается через соответствующие функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$, также невозмущенные этим воздействием, то идейная связь двухвременного формализма с материальными уравнениями линейной электродинамики усматривается практически сразу.

Для исследования нелинейных эффектов, т. е. случаев, когда величины ϵ , μ и σ оказываются зависящими от \mathbf{E} и \mathbf{H} , использование только двухвременных статистических конструкций, как было отмечено в § 2, уже недостаточно, и теоретические разработки в этом направлении оказываются более сложными.

Имея в виду слабые электродинамические воздействия на систему, мы, не сбавляясь общим рассмотрением сразу всей совокупности уравнений Максвелла и материальных уравнений, в последующем изложении ограничимся рассмотрением самых простых примеров реакций системы только на одно поле \mathbf{E} или поле \mathbf{H} , делая при этом и о самих реагирующих на это слабое воздействие системах тоже самые простые предположения.

а) Динамическая диэлектрическая проницаемость

Интересуясь динамической (в данном конкретном понимании — зависящей от частоты) реакцией системы, представим электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, поле индукции $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ и плотность числа частиц в системе $\rho(\mathbf{r}, t)$ в виде четырехмерных разложений Фурье

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\Omega} f(\mathbf{q}, \Omega) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \frac{i}{\hbar} \Omega t},$$

а в аналогичное представление для плотности пробного заряда $Q(\mathbf{r}, t)$, возмущающего систему, введем величину $e^{\frac{1}{\hbar} \epsilon t}$, обеспечивающую адиабатический характер включения возмущения, и безразмерную величину $\alpha(\mathbf{q}, \Omega)$, характеризующую интенсивность этого внешнего воздействия,

$$Q(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\Omega} e \alpha(\mathbf{q}, \Omega) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \frac{i}{\hbar} \Omega t} \cdot e^{\frac{1}{\hbar} \epsilon t}.$$

Полагая для простоты, что в тензоре $\epsilon_{\alpha\beta}$ основной частью является продольная диэлектрическая проницаемость (система без проявлений анизотропии «типа керосина», когда характеризующий ее тензор $\epsilon_{\alpha\beta}$ вырождается в скаляр ϵ),

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \epsilon_{\parallel} = \delta_{\alpha\beta} \epsilon,$$

определим динамическую диэлектрическую проницаемость как коэффициент пропорциональности между фурье-компонентами $\mathbf{D}(\mathbf{q}, \Omega)$ и $\mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega)$,

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}, \Omega) = \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) \mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega).$$

и данное правило суммы приобретает универсальный вид для всех систем с парным центральным взаимодействием частиц:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \omega J(\rho_q, \rho_q^+; \omega) d\omega = \frac{q^2}{2m} \langle N \rangle = \frac{q^2}{2m} N.$$

Приведем только один пример эффективного использования этого соотношения, который связан с реализацией ситуации, изображенной на рис. 19. Именно эта ситуация проявляется в низкотемпературной области для бозе-жидкости (жидкий He^4), в которой долгоживущие коллективные возбуждения типа фононов экспериментально просматриваются достаточно четко. Итак, предположим, что спектральная плотность $J(\rho_q, \rho_q^+; \omega) = J_q(\omega)$ содержит один δ -образный максимум на частоте $\Omega(q)$, которая считается заранее неизвестной, т. е.

$$J_q(\omega) = \text{const} \cdot \delta(\omega - \Omega(q)) = \langle \rho_q \rho_q^+ \rangle \delta(\omega - \Omega(q))$$

(мы учли здесь, что $I_1(q) = \langle \rho_q \rho_q^+ \rangle$). Тогда установленное правило суммы для такого вида $J_q(\omega)$ сразу определяет дисперсионную зависимость энергии этого возбуждения от импульса,

$$\Omega(q) = \frac{q^2}{2m} / \frac{1}{N} \langle \rho_q \rho_q^+ \rangle,$$

где величина $\langle \rho_q \rho_q^+ \rangle / N$ может быть определена с помощью анализа экспериментальных данных по рассеянию нейтронов на жидком гелии, вычислена отдельно, сопоставлена с другими характеристиками системы и т. д. К проблеме неидеального бозе-газа, одной из сложнейших задач квантовой статистики, мы специально вернемся в дальнейшем.

§ 6. Электромагнитные характеристики системы

Для решения задач электродинамики помимо классических уравнений электромагнитного поля Максвелла необходимо конкретизировать рассматриваемую систему с помощью так называемых материальных уравнений, связывающих вектор электрического поля \mathbf{E} с вектором индукции \mathbf{D} , вектор магнитного поля \mathbf{H} с вектором магнитной индукции \mathbf{B} и вектор \mathbf{E} с вектором плотности электрического тока \mathbf{j} . В линейной электродинамике эти связи имеют вид:

$$D_\alpha = \sum_{\beta} \epsilon_{\alpha\beta} E_\beta, \quad B_\alpha = \sum_{\beta} \mu_{\alpha\beta} H_\beta, \quad j_\alpha = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} E_\beta,$$

где индексы α и β пробегает значения x, y, z . Диэлектрическая проницаемость $\epsilon_{\alpha\beta}$, магнитная проницаемость $\mu_{\alpha\beta}$ и проводимость $\sigma_{\alpha\beta}$, таким образом, выступают в этой теории как бы уравнениями состояния системы (в термодинамическом смысле уравнением состояния системы является соотношение типа $D = \epsilon(\theta, v)E$ и т. п., т. е. само материальное уравнение), которые в феноменологической теории задаются на основе экспериментальных данных, а в микроскопической теории должны быть получены в результате решения соответствующих статистических задач, исходящих из задания системы на микроскопическом уровне.

Таким образом, решение общей проблемы о поведении системы в электромагнитных полях распределяется по характеру и методике исследований как бы по двум

Запишем то, что остается от уравнений Максвелла в электростатическом приближении (т. е. в приближении квазистатических процессов как в смысле электродинамики, т. е. без каких-либо эффектов запаздывания, так и в термодинамическом смысле) в виде

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 4\pi\Omega(\mathbf{r}, t), \\ \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 4\pi(Q(\mathbf{r}, t) + e\langle\rho(\mathbf{r}, t)\rangle), \end{cases}$$

где $e\langle\rho(\mathbf{r}, t)\rangle$ — локальное значение плотности индуцированного внешним источником объемного заряда в системе. Если перейти в импульсно-частотное представление

$$\begin{cases} -\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega) \cdot \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 4\pi e\alpha(\mathbf{q}, \Omega), \\ -\frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega) = 4\pi e\alpha(\mathbf{q}, \Omega) + 4\pi e\langle\rho(\mathbf{q}, \Omega)\rangle, \end{cases}$$

то, поделив второе уравнение на первое и исключив тем самым величину $\mathbf{q}\mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega)$, получим формулу, определяющую обратную величину динамической диэлектрической проницаемости системы:

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)} = 1 + \frac{\langle\rho(\mathbf{q}, \Omega)\rangle}{\alpha(\mathbf{q}, \Omega)}.$$

Чтобы определить возмущение плотности числа заряженных частиц $\langle\rho(\mathbf{q}, \Omega)\rangle$ отдельной гармоникой внешнего электростатического воздействия $\alpha(\mathbf{q}, \Omega)$ методом функций Грина, определим операторную структуру гамильтониана возмущения $\delta H(t)$. В электростатическом приближении имеем для энергии взаимодействия заряженных частиц с полем $\varphi(\mathbf{r}, t)$ в представлении вторичного квантования (см. гл. 1, § 3, п. и)) выражение

$$\delta H(t) = \sum_{1 \leq i \leq N} e\varphi(\mathbf{r}_i, t)e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon t} = \sum_{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{V} e\varphi(\mathbf{q}, \Omega)\rho_{\mathbf{q}}^+ e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\epsilon)t}.$$

Так как скалярный потенциал поля φ в координатно-временном и импульсно-частотном представлениях удовлетворяет уравнению Пуассона (в общем случае, Даламбера)

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\varphi(\mathbf{r}, t) = -4\pi Q(\mathbf{r}, t) \mapsto \frac{1}{\hbar^2}\left(q^2 - \frac{\Omega^2}{c^2}\right)\varphi(\mathbf{q}, \Omega) = 4\pi e\alpha(\mathbf{q}, \Omega),$$

то в электростатическом приближении, $\Omega^2/(c^2q^2) \ll 1$, получаем простую связь между компонентами поля и возмущающего систему внешнего заряда в виде

$$e\varphi(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{4\pi e^2\hbar^2}{q^2}\alpha(\mathbf{q}, \Omega) = \nu(q)\alpha(\mathbf{q}, \Omega),$$

где $\nu(q)$ — фурье-образ кулоновского потенциала точечного заряда e^2/R . Учитывая, что в линейной теории реакции системы достаточно рассматривать ее реакцию на отдельную гармонику внешнего воздействия, в операторе $\delta H(t)$ можно сохранить только одно слагаемое,

$$\delta H(t) = B(\mathbf{q}, \Omega)e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\epsilon)t}, \quad B(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{1}{V}\nu(q)\alpha(\mathbf{q}, \Omega).$$

В качестве оператора A у нас фигурирует фурье-компонента плотности числа частиц ρ_q . Так как $\langle \rho_q \rangle|_{\alpha=0} = 0$, то

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t &= \delta \langle A \rangle_t = \langle \rho(\mathbf{q}, \Omega) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\varepsilon)t} = \\ &= \langle \langle \rho_q | B(\mathbf{q}, \Omega) \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\varepsilon)t} = \alpha(\mathbf{q}, \Omega) \frac{\nu(\mathbf{q})}{V} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon}, \end{aligned}$$

и для обратной величины динамической диэлектрической восприимчивости получаем окончательный ответ:

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)} = 1 + \frac{\nu(\mathbf{q})}{V} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon} = 1 + \frac{\nu(\mathbf{q})}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J(\rho_q^+, \rho_q; \omega)(e^{\omega/\theta} - 1)}{\Omega - \omega + i\varepsilon}.$$

Таким образом, для определения квазистатической реакции системы на воздействующее на нее поле $E(\mathbf{q}, \Omega)$ необходимо располагать спектральной плотностью $J_q(\omega)$ типа плотность-плотность, той самой, которая определяет, как мы уже видели, многие другие характеристики системы. Можно при желании «вывернуть» задачу и сказать, что мнимая часть обратной диэлектрической проницаемости в соответствии с полученной нами формулой выражает спектральную плотность $J_q(\omega)$

$$J'(\rho_q^+, \rho_q; \omega) = J_q(\omega)(e^{\omega/\theta} - 1) = -\frac{V}{\nu(\mathbf{q})} \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)} = -V \frac{q^2}{4\pi e^2 \hbar^2} \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)}$$

и тем самым оказывается связанной с этими многими характеристиками системы и т. д.

Чтобы не создавать у читателя впечатления, что задача статистической механики исчерпывается получением красивых формул, доведем исследование этой темы до конца, сделав наипростейшую аппроксимацию для функции $J_q(\omega)$, и покажем, что уже в этом самом простом приближении полученная формула для $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$ будет содержать все основные результаты, характеризующие статистическую систему из заряженных частиц (т. е. дальнейшие приближения, улучшающие структуру спектральной плотности $J_q(\omega)$, будут давать уже что-то сверх традиционных результатов).

Итак, учитывая, что второе слагаемое в формуле для $1/\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ пропорционально $\nu(\mathbf{q}) \sim e^2$, будем считать его «поправочным», гарантируя все получающиеся в дальнейшем результаты только в низшем по заряду e порядке. Это позволяет нам использовать для функции Грина $\langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon}$ и спектральной плотности $J_q(\omega)$ приближение идеального газа, расчет которых не вызывает затруднений. Не оглядываясь на то, что в § 3 этой главы мы эту функцию Грина уже имели, произведем автономный ее расчет.

Учитывая, что для идеального ферми-газа, моделирующего электронную плазму, согласно гл. 1, § 3, п. ж)

$$a_p(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_p t} a_p, \quad a_p^+(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_p t} a_p^+,$$

имеем, используя при расчете среднего значения от произведения операторов рождения и уничтожения теорему о спариваниях для всех значений $\mathbf{q} \neq 0$ (т. е. учитывая наличие положительно заряженного фона тяжелых ионов, см. гл. 1, § 3, п. п)),

$$\langle \rho_q^+ \rho_q(t) \rangle = \sum_{pp'} \langle \overline{a_{p'-q}^+ a_{p'} a_{p+q}^+ a_p} \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p)t} = \sum_p n_p (1 - n_{p+q}) e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p)t},$$

откуда

$$J_q(\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \rho_q^+ \rho_q(t) \rangle = \sum_p n_p (1 - n_{p+q}) \delta(\omega - \epsilon_p + \epsilon_{p+q}).$$

Так как для идеального ферми-газа $n_p = (e^{\epsilon_p/\theta} + 1)^{-1}$ и

$$(e^{\omega/\theta} - 1)_{\omega=\epsilon_p-\epsilon_{p+q}} = e^{\epsilon_p/\theta} e^{-\epsilon_{p+q}/\theta} - 1 = \frac{1 - n_p}{n_p} \frac{n_{p+q}}{1 - n_{p+q}} - 1 = \frac{n_{p+q} - n_p}{n_p(1 - n_{p+q})},$$

то, сохраняя низший порядок по e^2 (т. е. переворачивая $1/\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$), получаем рабочую формулу:

$$\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) \cong 1 - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{\Omega - \epsilon_p + \epsilon_{p+q} + i\epsilon}.$$

Интересно отметить, что полученная в самом грубом приближении формула для $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$ полностью совпадает с результатом, который был получен в приближении самосогласованного поля. Действительно (см. § 3, п. в) этой главы), для функции Грина типа плотность-плотность во власовском приближении мы имели

$$\frac{\nu(\mathbf{q})}{V} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\epsilon}^{(Вл)} = \frac{\Pi(\mathbf{q}, \Omega + i\epsilon)}{1 - \Pi(\mathbf{q}, \Omega + i\epsilon)},$$

где «поляризационный» оператор определялся соотношением

$$\Pi(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{\nu(\mathbf{q})}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{\Omega + i\epsilon + \epsilon_{p+q} - \epsilon_p}.$$

Подставляя этот результат для функции Грина в основную формулу для $1/\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$, получаем

$$\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 1 - \Pi(\mathbf{q}, \Omega + i\epsilon),$$

что в точности совпадает с результатом нашей грубой оценки. Это приятное обстоятельство заранее гарантирует нам при дальнейшей обработке этого результата выявление таких специфических особенностей плазмы, как экранировка электростатического поля зарядов, плазменные колебания и их затухание и т. п. Убедимся в этом, проведя соответствующие несложные расчеты.

Рассматривая сначала случай статического возмущения системы заряженных частиц, положим $\Omega = 0$ и сдвинем индекс суммирования $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}/2$, $\mathbf{p} + \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{q}/2$. Тогда, учитывая, что $\epsilon_{p+q/2} - \epsilon_{p-q/2} = \mathbf{p}\mathbf{q}/m$, и полагая в случае малых значений q во всей области интегрирования по \mathbf{p}

$$q \ll p_{\max} = \begin{cases} p_F = \hbar \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} & \text{в случае } \theta \ll \epsilon_F, \\ \sqrt{3m\theta} & \text{в случае } \theta \gg \epsilon_F, \end{cases}$$

$$n_{p+q/2} - n_{p-q/2} = n \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{2m} + \frac{q^2}{8m} \right) - n \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{2m} + \frac{q^2}{8m} \right) = \frac{\partial n_p}{\partial \epsilon_p} \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m} + \dots,$$

для электростатической диэлектрической проницаемости сразу получаем выражение

$$\epsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{V} \sum_p \frac{n_{p+q/2} - n_{p-q/2}}{\mathbf{p}\mathbf{q}/m} = 1 + \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} f(q),$$

где

$$f(q) = -\frac{1}{V} \sum_p \frac{\partial n_p}{\partial \epsilon_p} = \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{V} \sum_p n_p = \frac{\partial n(\theta, \mu)}{\partial \mu}$$

(мы учли здесь, что средние числа заполнения зависят от $\epsilon_p = E_p - \mu$). Чтобы взять производную $\partial n(\theta, \mu)/\partial \mu$, воспользуемся известным результатом (см. т. 2, гл. 2), полученным для идеального ферми-газа в области низких и высоких температур,

$$n(\theta, \mu) = \frac{N(\theta, \mu)}{V} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int n_p d\mathbf{p} = \begin{cases} \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4}{3} \pi p_F^3 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \ll \epsilon_F, \\ \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} e^{\mu/\theta} (2\pi m \theta)^{3/2} \left(1 - \frac{2}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\epsilon_F}{\theta} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \gg \epsilon_F. \end{cases}$$

Таким образом, для «потенциала», определяющего эффективно действующее в среде поле $\mathbf{D}(\mathbf{q}, 0)$, создаваемого точечным зарядом, получаем в импульсном и координатном представлениях

$$\tilde{\nu}(\mathbf{q}) = \frac{\nu(\mathbf{q})}{\epsilon(\mathbf{q}, 0)} = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2 + \hbar^2 \kappa^2} \mapsto \tilde{\varphi}(r) = \frac{e^2}{r} e^{-\kappa r},$$

где

$$\kappa^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n(\theta, \mu)}{\partial \mu} = \begin{cases} \kappa_F^2 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \ll \epsilon_F, \\ \kappa_D^2 \left(1 - \frac{2}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\epsilon_F}{\theta} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \gg \epsilon_F \end{cases}$$

и где

$$\kappa_F^2 = \frac{6\pi e^2 n}{\epsilon_F}; \quad \kappa_D^2 = \frac{4\pi e^2 n}{\theta},$$

а величины $r_F = 1/\kappa_F$ и $r_D = 1/\kappa_D$ определяют знакомые радиусы томас-фермиевской и дебаевской экранировок (см. т. 2, гл. 3, § 1, п. д).

Исследуем теперь случай собственных колебаний в системе заряженных частиц. Так как в этом случае внешнего воздействия на систему нет, то $\alpha(\mathbf{q}, \Omega) = 0$, но колебания плотности числа частиц по предположению в системе имеются, т. е. $\langle \rho(\mathbf{q}, \Omega) \rangle \neq 0$, поэтому согласно второму из исходных электростатических соотношений величина $-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega) = 4\pi e \langle \rho(\mathbf{q}, \Omega) \rangle$ тоже отлична от нуля (т. е. $\mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega) \neq 0$), а так как согласно первому соотношению $-\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \mathbf{E}(\mathbf{q}, \Omega) \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0$, то это означает, что собственные колебания в системе возможны в том случае, когда их частота Ω и импульс \mathbf{q} связаны соотношением

$$\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0,$$

определяющим дисперсионную зависимость $\Omega = \Omega(\mathbf{q})$. Этот же вывод можно получить и из формальных соображений: так как согласно результатам гл. 2 полюсы функции Грина, в нашем случае связанной с диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$ соотношением

$$\langle \langle \rho_{\mathbf{q}} | \rho_{\mathbf{q}}^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\epsilon} = \frac{V}{v(\mathbf{q})} \frac{1 - \epsilon(\mathbf{q}, \Omega)}{\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)},$$

определяют характеризующие систему резонансы $\Omega = \Omega(\mathbf{q})$, то нули ее знаменателя как раз соответствуют условию $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0$.

Чтобы раскрыть это условие, несколько изменим вид формулы для $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$, разделив выражение, стоящее под знаком суммы, на два слагаемых, и в первом из них (содержащем $n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}$) сделаем замену $\mathbf{p} + \mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{p}$ (т. е. $\mathbf{p} \rightarrow -(\mathbf{p} + \mathbf{q})$). Тогда

$$\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} \left(\frac{1}{\Omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}} + i\epsilon} - \frac{1}{\Omega + \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}} + i\epsilon} \right),$$

где мы ввели обозначение

$$\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}} = \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m} + \frac{q^2}{2m}.$$

Рассматривая, как и раньше, область малых значений $q \ll p_{\max}$ (но конечных при $q \rightarrow 0$ значений Ω), представим каждую из дробей $1/(\Omega \mp \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}})$ в виде

$$\frac{1}{\Omega \mp \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}} = \frac{1}{\Omega} \pm \frac{\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}}{\Omega} \frac{1}{\Omega \mp \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}} = \frac{1}{\Omega} \pm \frac{\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}}{\Omega^2} + \frac{\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^2}{\Omega^3} \pm \frac{\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^3}{\Omega^4} + \frac{\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^4}{\Omega^4(\Omega \mp \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}})}$$

(это не разложение в ряд Тейлора, а точное соотношение, которое при желании можно удлинять еще дальше). Стоящая в скобках разность этих выражений сохраняет лишь удвоенные четные слагаемые этого представления, которое далее следует усреднить с весом $n_{\mathbf{p}}$.

Так как в т. 3, гл. 5 мы достаточно подробно рассмотрели вопрос о плазменных колебаниях в классическом варианте, то, чтобы убедиться, что в нашем приближении эти фундаментальные результаты содержатся полностью, и при этом не перегружать изложение взятием фермиевских интегралов (эта техника представлена в т. 2, гл. 2, § 2, и желающие могут ей воспользоваться), ограничимся рассмотрением высокотемпературного случая. Учитывая, что в квазиклассическом пределе

$$n_{\mathbf{p}} = e^{\mu/\theta} e^{-p^2/(2m\theta)} = \frac{(2\pi\hbar)^3}{2(2\pi m\theta)^{3/2}} \frac{N}{V} e^{-p^2/(2m\theta)} = \frac{(2\pi\hbar)^3}{2} \frac{1}{v} w_M(\mathbf{p}),$$

где $w_M(\mathbf{p})$ — нормированное на единицу распределение Максвелла по импульсам. Тогда, обозначая чертой сверху среднее по максвелловскому распределению, имеем для реальной части диэлектрической проницаемости

Re $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) =$

$$= 1 - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{v} \left\{ \frac{2}{\Omega^2} \overline{\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m} + \frac{q^2}{2m} \right)} + \frac{2}{\Omega^4} \overline{\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m} + \frac{q^2}{2m} \right)^2} + \frac{\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^4}{\Omega^4} \overline{\left(\frac{1}{\Omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}} - \frac{1}{\Omega + \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}} \right)} \right\}.$$

Учитываем, что $\overline{\mathbf{pq}} = \overline{(\mathbf{pq})^3} = 0$ и, сохраняя в этом выражении члены, пропорциональные q^0 (т. е. не зависящие от q) и q^2 , получим

$$\operatorname{Re} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) \cong 1 - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{v} \frac{q^2}{m\Omega^2} \left(1 + \frac{3}{\Omega^2} \overline{\left(\frac{\mathbf{pq}}{m}\right)^2} \right).$$

Чтобы вычислить оставшееся среднее, выберем в пространстве импульсов оси так, чтобы $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$. Тогда, учитывая симметрию распределения $w_M(\mathbf{p})$ относительно компонент p_x, p_y, p_z , получим

$$\frac{3}{\Omega^2} \overline{\left(\frac{\mathbf{pq}}{m}\right)^2} = \frac{3}{\Omega^2} \frac{q^2}{m^2} \overline{p_x^2} = \frac{q^2}{\Omega^2 m^2} \overline{p^2} = \frac{2q^2}{\Omega^2 m} \overline{\left(\frac{p^2}{2m}\right)} = \frac{3\theta}{m\Omega^2} q^2.$$

Решая теперь уравнение $\operatorname{Re} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0$ относительно Ω и обозначая

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi e^2}{mv}$$

(квадрат ленгмюровской частоты), получаем в низшем по q^2 приближении для частоты плазменных колебаний основной ленгмюровский результат $\Omega_{q=0} = \hbar\omega_0$ с квадратичной по импульсу температурной власовской поправкой (см. т. 3, гл. 5, § 5),

$$\Omega \cong \hbar\omega_0 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\theta}{m\omega_0^2} q^2 \right)$$

(следующие поправки, пропорциональные q^4 и далее, читатель может рассчитать по использованной нами методике).

В вырожденном случае $\theta \ll \varepsilon_F$ нам следовало бы, следуя т. 2, гл. 2, § 2, вместо $\frac{3}{2}\theta$ подставить

$$\overline{\left(\frac{p^2}{2m}\right)} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left(1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F}\right)^2 + \dots \right),$$

и мы получим тогда

$$\Omega \cong \hbar\omega_0 \left(1 + \frac{3}{5} \frac{\varepsilon_F}{m\omega_0^2} q^2 \right).$$

Полученный результат, естественно, не является полным, и приближение по q^2 здесь ни при чем, так как в случае отличной от нуля мнимой части $\operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) \neq 0$ уравнение $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0$ не имеет действительных решений. Рассмотрим этот вопрос подробнее, ориентируясь, как и раньше, в основном на квазиклассическое приближение $\theta \gg \varepsilon_F$. Полагая $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$, $\mathbf{pq} = p_x q$, имеем, сразу проинтегрировав максвелловское распределение по dp_y и dp_z ,

$$\operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{v} \frac{1}{(2\pi m\theta)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x e^{-p_x^2/(2m\theta)} \times \\ \times \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{\Omega - \frac{p_x q}{m} - \frac{q^2}{2m} + i\varepsilon} - \frac{1}{\Omega + \frac{p_x q}{m} + \frac{q^2}{2m} + i\varepsilon} \right\}.$$

Так как

$$\operatorname{Im} \frac{1}{ax + i\varepsilon} = -i\pi\delta(ax) = -i\frac{\pi}{a}\delta(x),$$

то, не вводя никаких ограничений на величину q , получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) &= \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{v} \frac{1}{(2\pi m \theta)^{1/2}} \frac{\pi m}{q} \times \\ &\times \left[\exp \left\{ -\frac{m}{2q^2 \theta} \left(\Omega - \frac{q^2}{2m} \right)^2 \right\} - \exp \left\{ -\frac{m}{2q^2 \theta} \left(\Omega + \frac{q^2}{2m} \right)^2 \right\} \right] = \\ &= \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{v} \frac{1}{(2\pi m \theta)^{1/2}} \frac{\pi m}{q} e^{-m\Omega^2/(2q^2\theta)} \cdot e^{-q^2/(8m\theta)} \left(e^{\Omega/(2\theta)} - e^{-\Omega/(2\theta)} \right). \end{aligned}$$

В квазиклассическом приближении, учитывая, что $q = \hbar k$, $\Omega = \hbar\omega_{\text{кл}}$, мы должны положить

$$e^{-q^2/(8\theta)} = e^{-\hbar^2 k^2/(8\theta)} = 1, \quad e^{\Omega/(2\theta)} - e^{-\Omega/(2\theta)} = \frac{\Omega}{\theta} = \frac{\hbar\omega_{\text{кл}}}{\theta},$$

в результате чего

$$\operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{(\hbar\omega_0)^2 \Omega}{q^3} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{m}{\theta} \right)^{3/2} e^{-m\Omega^2/(2q^2\theta)}.$$

Переходя к рассмотрению уравнения для $\Omega = \Omega(q)$

$$\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = \operatorname{Re} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) + i \operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0,$$

мы замечаем, во-первых, что оно не имеет действительных решений, а во-вторых, так как выражение для $\operatorname{Re} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$ было получено для случая малых импульсов,

$$\operatorname{Re} \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 1 - \frac{\hbar\omega_0^2}{\Omega^2} \left(1 + \frac{3\theta}{m\Omega^2} q^2 + \dots \right),$$

то и решать его можно тоже только в этом же приближении. Опуская поправку, пропорциональную q^2 (т. е. полагая в самом грубом приближении $\Omega = \hbar\omega_0$), будем искать решение в виде

$$\tilde{\Omega} = \hbar\omega_0 - i\hbar\gamma = \hbar\omega_0 \left(1 - i\frac{\gamma}{\omega_0} \right),$$

которое, если оно предназначено для описания колебательного процесса, имеет смысл в случае $\gamma/\omega_0 \ll 1$. Тогда уравнение $\epsilon(\mathbf{q}, \tilde{\Omega}) = 0$ будет в самом грубом приближении иметь вид

$$0 \cong 1 - \frac{1}{(1 - i\gamma/\omega_0)} + i \operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \hbar\omega_0) \cong 1 - \left(1 + i\frac{2\gamma}{\omega_0} \right) + i \operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \hbar\omega_0),$$

откуда следует известное выражение для затухания Ландау

$$\gamma = \frac{\operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{q}, \hbar\omega_0)}{2} \omega_0 = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\omega_0 \kappa^3}{k^3} e^{-\kappa^2/(2k^2)},$$

где $\kappa^2 = 4\pi e^2/\theta v$ — обратная величина квадрата дебаевского радиуса экранировки.

Мы получили, таким образом, что колебания в статистической системе заряженных частиц происходят по закону

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{\Omega}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega t - \gamma t}$$

с частотой $\Omega(q) = \hbar\omega_0(1 + \dots)$ и затуханием $\gamma(q)$ при условии $\gamma \ll \omega_0$, ограничивающим значение импульса $q = \hbar k$ областью $k^2 \ll k_{\max}^2 \cong \kappa^2/3$. Интерпретацией этих результатов мы займемся несколько позже, а сейчас кратко остановимся на ситуации в вырожденном случае $\theta/\varepsilon_F \rightarrow 0$.

Не ограничиваясь сначала случаем низких температур, имеем, полагая $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$,

$$\begin{aligned} \text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = & -\frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \times \\ & \times \int dp \frac{1}{\exp\left\{\frac{p^2}{2m\theta} - \frac{\mu}{\theta}\right\} + 1} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\Omega - \frac{p_x q}{m} - \frac{q^2}{2m} + i\varepsilon} - \frac{1}{\Omega + \frac{p_x q}{m} + \frac{q^2}{2m} + i\varepsilon} \right\}. \end{aligned}$$

Так как двойной интеграл по $dp_y dp_z$ берется без труда, если воспользоваться цилиндрическими координатами,

$$\begin{aligned} \iint_{-\infty}^{+\infty} dp_y dp_z \frac{1}{\exp\left\{\frac{p^2}{2m\theta} - \frac{\mu}{\theta}\right\} + 1} = \\ = \int_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho \frac{1}{\exp\left\{\frac{\rho^2}{2m\theta} - \left(\frac{\mu}{\theta} - \frac{p_z^2}{2m\theta}\right)\right\} + 1} = 2m\theta \frac{1}{\exp\left\{\frac{p_z^2}{2m\theta} - \frac{\mu}{\theta}\right\} + 1}, \end{aligned}$$

то, взяв мнимую часть от фигурных скобок, получаем

$$\begin{aligned} \text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = & \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi m\theta \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x \frac{1}{\exp\left\{\frac{p_x^2}{2m\theta} - \frac{\mu}{\theta}\right\} + 1} \times \\ & \times \left\{ \frac{\pi m}{q} \delta\left(p_x - \frac{m}{q}\left[\Omega - \frac{q^2}{2m}\right]\right) - \frac{\pi m}{q} \delta\left(p_x + \frac{m}{q}\left[\Omega + \frac{q^2}{2m}\right]\right) \right\} = \\ = & \frac{\pi m}{q} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi m\theta \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{\exp\left\{\frac{m}{2q^2\theta}\left(\Omega - \frac{q^2}{2m}\right)^2 - \frac{\mu}{\theta}\right\} + 1} - \frac{1}{\exp\left\{\frac{m}{2q^2\theta}\left(\Omega + \frac{q^2}{2m}\right)^2 - \frac{\mu}{\theta}\right\} + 1} \right\}. \end{aligned}$$

Это выражение справедливо при любых температурах, и в квазиклассическом пределе $\theta \gg \varepsilon_F$ из него следуют результаты предыдущего рассмотрения. Интересуясь теперь низкотемпературным поведением $\text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$, сразу замечаем, что в пределе $\theta/\varepsilon_F \rightarrow 0$ оба слагаемых в фигурных скобках обращаются в нули как только

$$\frac{m}{2q^2} \left(\Omega \mp \frac{q^2}{2m} \right)^2 \cong \frac{m\Omega^2}{2q^2} > \mu_0 = \varepsilon_F.$$

Полагая в самом грубом приближении $\Omega = \hbar\omega_0$, получаем таким образом, что в случае $\theta = 0$ в области

$$q^2 < \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{\varepsilon_F} \cdot \frac{m}{2} = \hbar^2 \frac{1}{3} \kappa_F^2,$$

где $\kappa_F^2 = 6\pi e^2 / (v\varepsilon_F)$, затухание колебаний вообще отсутствует. При включении температуры учет баланса слагаемых в фигурных скобках при самой грубой оценке (т. е. пренебрежении членами, пропорциональными q^2 везде, где это допустимо) приводит к появлению в выражении для $\text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$ такой же экспоненты $e^{-m\Omega^2 / (2q^2\theta)}$, как и в рассмотренном ранее случае, обеспечивающей экспоненциально малое затухание колебаний плотности в системе при $\theta \rightarrow 0$ во всей области $q < q_{\max}$.

Сделаем несколько замечаний по поводу полученных результатов.

Прежде всего, так как уравнение $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0$ содержит экспоненциальные конструкции, не представимые в виде разложения по степеням q^2 , то полученная оценка для частоты плазменных колебаний вида

$$\Omega(q) = \hbar\omega_0(1 + \alpha q^2 + \beta q^4 + \dots)$$

представляет лишь первые члены асимптотического разложения этой величины в случае малых значений q^2 , когда упомянутые экспоненциальные конструкции дают экспоненциально малые поправки к этим членам разложения.

Переходя к рассмотрению результатов, полученных для $\text{Im } \epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$, остановимся сначала на случае $\theta = 0$, когда мы можем свободно использовать известные квантово-механические представления. Запишем уравнение $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0$ в виде

$$1 = \frac{\nu(q)}{V} \sum_p n_p \left(\frac{1}{\Omega - \omega_{pq} + i\varepsilon} + \frac{1}{-\Omega - \omega_{pq} - i\varepsilon} \right)$$

(слагаемые в скобках в главных значениях симметричны относительно замены $\Omega \leftrightarrow -\Omega$) и исследуем его графически (см. рис. 20, на котором представлена только область $\Omega > 0$; область отрицательных Ω зеркальна по отношению к изображенной), демонстративно не переходя к интегрированию по \mathbf{p} , так что точки пересечения линии $y = 1$ с линиями $y = 1/(\Omega - \omega_{pq})$, спроектированные на ось $x = \Omega$, образуют те значения Ω , которые соответствуют условию $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega) = 0$ (или полюсам функции Грина $\langle\langle \rho_{\mathbf{q}} | \rho_{\mathbf{q}}^+ \rangle\rangle_{\Omega+i\varepsilon}$).

Необходимо заметить, что благодаря наличию фактора n_p , равного нулю при $p > p_F$, возникает ограничение на величину ω_{pq} ,

$$(\omega_{pq})_{\max} = \left(\frac{(\mathbf{p} + \mathbf{q})^2}{2m} - \frac{p^2}{2m} \right)_{\max} = \left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{q}}{m} + \frac{q^2}{2m} \right)_{\max} = \frac{p_F q}{m} + \frac{q^2}{2m} \cong \frac{p_F q}{m}$$

(ради арифметической простоты мы ограничиваемся в основном случае $q \ll \varepsilon_F$). Таким образом, этот квазидискретный спектр решений $\Omega_{pq} \cong \omega_{pq}$, соответствующий возбуждениям отдельных частиц системы с изменением импульса $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{q}$ (в статистическом предельном случае этот спектр сливается в разрез, соответствующий непрерывному спектру одночастичных возбуждений), имеет верхнюю границу (см. рис. 21), выше которой располагается изолированный корень $\Omega(q) = \hbar\omega_0(1 + \dots)$, определяющий частоту незатухающих плазменных колебаний. С увеличением q граница квазичастичного спектра возбуждений приближается к плазменному корню, и при $q \geq \hbar\kappa_F/\sqrt{3}$ достигает его (дискретный уровень $\Omega(q)$ оказывается в зоне

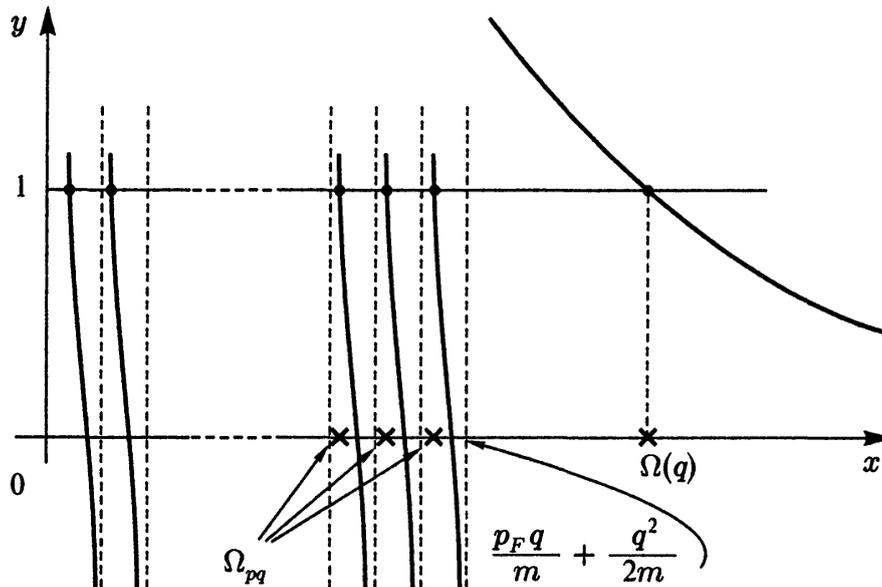


Рис. 20. Графическое исследование уравнения $\epsilon(q, \Omega) = 0$ в области $\Omega > 0$ в случае $\theta = 0$. Вертикальные пунктирные асимптоты соответствуют значениям $x = \omega_{pq}$, крестиками обозначены на оси x решения $\Omega_{pq} \cong \omega_{pq}$, соответствующие энергиям возбуждений отдельных частиц системы, $\Omega(q)$ — плазменная частота

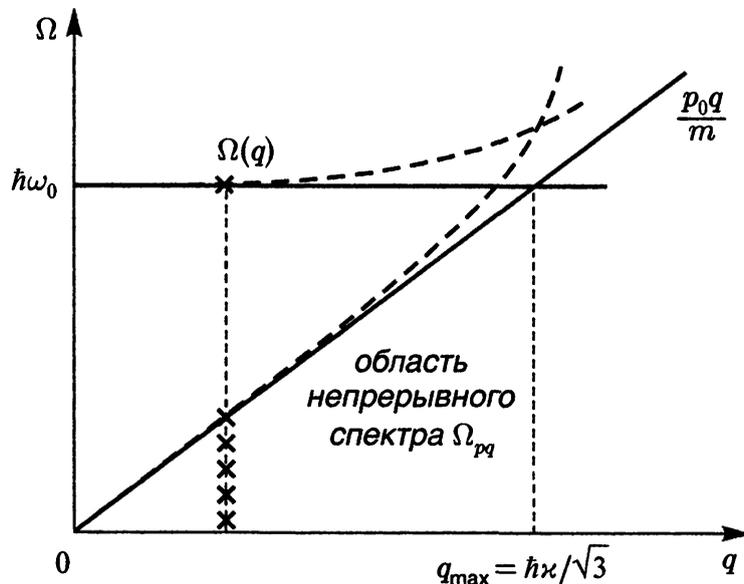


Рис. 21. Графическое представление области существования долгоживущих плазменных колебаний. Пунктиром изображены графики плазменной частоты $\Omega(q)$ и верхней границы непрерывного спектра одночастичных возбуждений $p_0 q / m + q^2 / (2m)$, где $p_0 = p_F$ в случае $\theta = 0$ и $p_0 = \sqrt{3m\theta}$ в случае $\theta \gg \epsilon_F$

непрерывного спектра возбуждений Ω_{pq} и перестает как таковой существовать), что приводит, как мы показали выше, к появлению значительной величины $\text{Im } \epsilon(q, \Omega)$ и исчезновению коллективных колебаний в системе. Аппроксимируя в самом грубом приближении $\Omega(q) = \hbar\omega_0$ и $(\omega_{pq})_{\max} = p_F q / m$, получаем согласно рис. 21 $\hbar\omega_0 = p_F q_{\max} / m$, откуда следует $q_{\max}^2 = \hbar^2 \kappa_F^2 / 3$.

В случае $\theta \neq 0$ резкой границы $(\omega_{pq})_{\max}$ уже нет, и непрерывный спектр квазичастичных возбуждений занимает на рис. 21 всю верхнюю часть плоскости $(\Omega-q)$,

так что плазменные колебания должны затухать всегда. Однако термодинамическое состояние системы определяется как смешанное квантово-механическое состояние, определяемое гиббсовским распределением, и состояния частиц, в частности, в крайнем квазиклассическом случае с импульсом $p > p_0 = \sqrt{3m\theta}$ оказываются маловероятными — это экспоненциальный хвост максвелловского распределения. Именно благодаря этому обстоятельству плазменное возбуждение, расположенное по энергии выше эффективной границы энергий одночастичных возбуждений p_0q/m , приобретает затухание той же экспоненциальной структуры. Оценка импульса исчезновения плазменных колебаний, произведенная по аналогии со случаем $\theta = 0$, дает аналогичный же результат $q_{\max}^2 = \hbar^2 \kappa^2 / 3$. То же самое происходит и в низкотемпературном случае: «включение» температуры сразу размывает фермиевскую ступеньку, и ее экспоненциальный хвост в области $p > p_F$ аналогичным образом определяет тоже экспоненциальную структуру мнимой части $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$ и соответственно затухания плазменных колебаний.

б) Магнитная восприимчивость системы заряженных частиц

Продолжая исследование свойств статистической системы заряженных частиц, рассмотрим, как она реагирует на включение внешнего магнитного поля $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$. Представим это поле, а также поле магнитной индукции $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$, плотность внешнего электрического тока $\mathbf{I}(\mathbf{r}, t)$, создающего возмущение системы, и плотность вынужденных токов заряженных частиц системы $e\langle \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \rangle$, как и в п. а) этого параграфа, в виде четырехмерного фурье-разложения по пространственным волнам и временным гармоникам. Для упрощения дальнейшего рассмотрения будем пока считать, что все N частиц системы, имеющие заряд e , не обладают собственным магнитным моментом.

Рассматривая задачу в квазистационарном (в электродинамическом понимании) и квазистатическом (в термодинамическом смысле) приближениях, выпишем характерные для этого случая уравнения Максвелла в координатно-временном и соответствующем импульсно-частотном представлениях,

$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c} (\mathbf{I}(\mathbf{r}, t) + e\langle \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \rangle), \\ \text{rot } \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{I}(\mathbf{r}, t); \\ -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{q} \times \mathbf{B}(\mathbf{q}, \Omega)] = \frac{4\pi}{c} (\mathbf{I}(\mathbf{q}, \Omega) + e\langle \mathbf{j}(\mathbf{q}, \Omega) \rangle), \\ -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{q} \times \mathbf{H}(\mathbf{q}, \Omega)] = \frac{4\pi}{c} \mathbf{I}(\mathbf{q}, \Omega). \end{cases}$$

Чтобы избавиться от неудобных векторных величин и обозначений, направим вектор \mathbf{H} традиционно вдоль оси z , $\mathbf{H} = (0, 0, H)$, вектор \mathbf{q} — вдоль оси x , $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$, вектор \mathbf{I} , перпендикулярный к ним обоим, будет направлен вдоль оси y , и вся схема расположения векторов будет иметь вид, представленный на рис. 22.

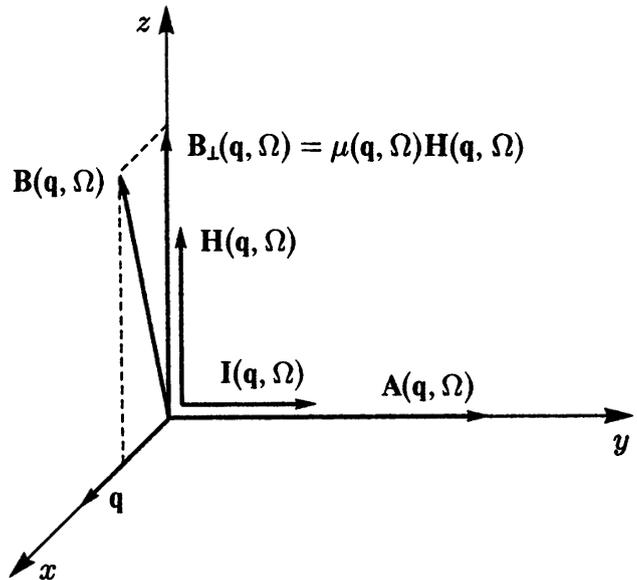


Рис. 22. Расположение векторных величин плотности внешнего тока \mathbf{I} , магнитного поля \mathbf{H} , поля индукции \mathbf{B} и соответствующего им векторного потенциала \mathbf{A} при квазистационарном воздействии на систему

Выделим поперечную по отношению к вектору \mathbf{q} составляющую вектора индукции $\mathbf{B}(\mathbf{q}, \Omega)$ и определим динамическую магнитную проницаемость как

$$B_{\perp}(\mathbf{q}, \Omega) = \mu_{\perp}(\mathbf{q}, \Omega)H(\mathbf{q}, \Omega)$$

и, пренебрегая анизотропной продольной составляющей $B_{\parallel}(\mathbf{q}, \Omega) = \mu_{\parallel}(\mathbf{q}, \Omega)H_{\parallel}(\mathbf{q}, \Omega)$, будем считать проницаемость $\mu_{\perp}(\mathbf{q}, \Omega) = \mu(\mathbf{q}, \Omega)$ скалярной величиной. Тогда импульсно-частотный вариант системы уравнений уже в скалярном варианте будет иметь вид,

$$\begin{cases} -\frac{i}{\hbar}qB_{\perp}(\mathbf{q}, \Omega) = -\frac{i}{\hbar}q\mu(\mathbf{q}, \Omega)H(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{4\pi}{c}(I(\mathbf{q}, \Omega) + e\langle j(\mathbf{q}, \Omega) \rangle), \\ -\frac{i}{\hbar}qH(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{4\pi}{c}I(\mathbf{q}, \Omega), \end{cases}$$

откуда сразу следует формула для магнитной проницаемости

$$\mu(\mathbf{q}, \Omega) = 1 + \frac{e\langle j(\mathbf{q}, \Omega) \rangle}{I(\mathbf{q}, \Omega)}.$$

Чтобы исключить из этого выражения плотность внешнего тока $I(\mathbf{q}, \Omega)$ и в удобной форме записать потом гамильтониан возмущения системы $\delta H(t)$, введем в рассмотрение векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ и его фурье-образ $\mathbf{A}(\mathbf{q}, \Omega)$. В квазистационарном приближении $q^2 c^2 / \Omega^2 \gg 1$ он удовлетворяет уравнениям

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{I}(\mathbf{r}, t), & \begin{cases} \frac{q^2}{\hbar^2} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{I}(\mathbf{q}, \Omega), \\ \mathbf{q} \mathbf{A}(\mathbf{q}, \Omega) = 0, \end{cases} \\ \operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0; \end{cases}$$

второй вариант которых позволяет представить величину $\mu(\mathbf{q}, \Omega)$ и соответствующую ей магнитную восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \mu)$ в виде

$$\mu(\mathbf{q}, \Omega) = 1 + \frac{4\pi e \hbar^2}{q^2} \frac{\langle j(\mathbf{q}, \Omega) \rangle}{A(\mathbf{q}, \Omega)} = 1 + 4\pi \chi(\mathbf{q}, \Omega).$$

Эта формула подобна той, которую мы получаем для обратной диэлектрической проницаемости $1/\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$, и то, что они по отношению друг к другу как бы перевернуты вверх ногами, не должно нас смущать: по утверждению физиков старой школы при сопоставлении электрических и магнитных полей надо считать «аналогом» поля \mathbf{E} не поле \mathbf{H} , а поле магнитной индукции \mathbf{B} , и соответственно «аналогом» поля индукции \mathbf{D} — магнитное поле \mathbf{H} (если о существовании такой аналогии можно вообще серьезно говорить).

При получении выражения для возмущающей систему части гамильтониана $\delta H(t)$ мы будем полагать, что включение поля $\mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$ не влияет на закон взаимодействия частиц друг с другом, так что гамильтониан взаимодействия H_1 не меняется, в то время как в аддитивной части гамильтониана необходимо сделать замену $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Таким образом, используя координатное представление операторов рождения и уничтожения, для этой части гамильтониана имеем

$$\mathcal{H} = \int_{(V)} d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}) \left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \mu \right\} \Psi(\mathbf{r}) =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{(V)} d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu \right\} \Psi(\mathbf{r}) + \\
&+ \int_{(V)} d\mathbf{r} \left(-\frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) \frac{1}{2m} \left(\Psi^+ \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi - \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^+ \cdot \Psi \right) + \\
&+ \int_{(V)} d\mathbf{r} \frac{1}{2m} \left(-\frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \Psi^+ \Psi = \mathcal{H}_0 + \delta \mathcal{H}_1 + \delta \mathcal{H}_2.
\end{aligned}$$

Определяя традиционным образом оператор плотности потока числа частиц

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{c}{e} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} = \frac{1}{2m} \left(\Psi^+ \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi - \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi^+ \cdot \Psi \right) - \\
&- \frac{e}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \Psi^+(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t),
\end{aligned}$$

представим его в импульсном представлении

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}, t) = \int_{(V)} d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t).$$

Учитывая, что (см. гл. 1, § 3, п. к)).

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} a_p, \quad \Psi^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{p'} e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}} a_{p'}^+, \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{q'} e^{-i\mathbf{q}'\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{q}', t),$$

сместим в части \mathbf{j}_0 индекс суммирования $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{q}/2$, $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}' - \mathbf{q}'/2$, тогда после взятия интегралов по $d\mathbf{r}$ и учета возникающих при этом импульсных Δ -функций, получим, рационально распорядившись обозначениями индексов суммирования,

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}, t) = \sum_p \frac{\mathbf{p}}{m} a_{p+\mathbf{q}/2}^+ a_{p-\mathbf{q}/2} - \frac{e}{mc} \frac{1}{V} \sum_{q'} \mathbf{A}(\mathbf{q}' + \mathbf{q}, t) \rho^+(\mathbf{q}') = \mathbf{j}_0(\mathbf{q}) + \mathbf{j}_1(\mathbf{q}, t),$$

где, как всегда,

$$\sum_p a_{p-\mathbf{q}'}^+ a_p = \rho^+(\mathbf{q}') = \rho_{\mathbf{q}'}^+.$$

Заметим теперь, что, относя индекс $\mathbf{A} = 0$ к процедуре взятия среднего $\langle \dots \rangle$, имеем

$$\langle \mathbf{j}_0(\mathbf{q}) \rangle_{\mathbf{A}=0} = 0,$$

так что для определения реакции тока \mathbf{j} на включение поля \mathbf{A} от этой его части \mathbf{j}_0 необходимо будет рассматривать величину $\delta \langle \mathbf{j}_0(\mathbf{q}) \rangle$. В то же время, ввиду того что $\langle a_{p-\mathbf{q}'}^+ a_p \rangle_{\mathbf{A}=0} = \Delta(\mathbf{q}') n_p$, величина $\langle \mathbf{j}_1 \rangle_{\mathbf{A}=0}$ оказывается не только отличной от нуля, но и изначально первого порядка по \mathbf{A} ,

$$\langle \mathbf{j}_1(\mathbf{q}, t) \rangle_{\mathbf{A}=0} = -\frac{e}{mc} \frac{1}{V} \sum_{q'} \mathbf{A}(\mathbf{q}' + \mathbf{q}, t) \sum_p \langle a_{p-\mathbf{q}'}^+ a_p \rangle_{\mathbf{A}=0} = -\frac{e}{mc} \frac{N}{V} \mathbf{A}(\mathbf{q}, t),$$

и никакой реакции $\delta \langle \mathbf{j}_1 \rangle$, имея в виду учет только первого порядка по \mathbf{A} , рассматривать от этой части тока не надо.

Для расчета реакции $\delta\langle j_0(\mathbf{q}) \rangle$ в операторе $\delta H(t)$ достаточно сохранить только линейную часть возмущения $\delta H_1(t)$:

$$\delta H_1(t) = \int_{(V)} d\mathbf{r} \left(-\frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) \mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \left(-\frac{e}{c} \right) \mathbf{A}(\mathbf{q}, t) \mathbf{j}_0(-\mathbf{q}, t).$$

Тогда, сохраняя, как всегда, в этом операторе только одну гармонику для амплитуды векторного потенциала

$$A(\mathbf{q}, t) = A(\mathbf{q}, \Omega) e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\varepsilon)t},$$

имеем, опуская уже лишние векторные обозначения (согласно рис. 22 А||I),

$$\delta H_{q\Omega} = -\frac{1}{V} \frac{e}{c} A(\mathbf{q}, \Omega) j_0^+(\mathbf{q}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\varepsilon)t},$$

откуда следует согласно § 20, п. б) этой главы

$$\delta\langle j_0(\mathbf{q}, \Omega) \rangle = -\frac{e}{c} A(\mathbf{q}, \Omega) \frac{1}{V} \langle \langle j_0(\mathbf{q}) | j_0^+(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\varepsilon)t},$$

и мы получаем окончательно для магнитной проницаемости системы общую формулу

$$\mu(\mathbf{q}, \Omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2 c^2} \left\{ \frac{N}{V} \frac{1}{m} + \frac{1}{V} \langle \langle j_0(\mathbf{q}) | j_0^+(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon} \right\}.$$

Как и в разделе, посвященном диэлектрической проницаемости, приведем пример использования этой формулы в случае простейшей аппроксимации для функции Грина типа ток-ток, который, тем не менее, приведет нас к знакомым результатам для магнитной восприимчивости системы заряженных частиц. Это, во-первых, придаст нам уверенности в том, что полученная формула правильна, и, во-вторых, даст нам право говорить, что любое улучшение приближения для $\langle \langle j | j^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon}$ приведет к появлению уже каких-то более сложных результатов.

Итак, рассмотрим систему заряженных частиц в постоянном однородном поле H . С точки зрения наших формул это означает $\Omega = 0$ (статическое возмущение) в пределе $q \rightarrow 0$ (т. е. $\lambda = 2\pi\hbar/q \rightarrow \infty$ — пространственно однородный случай).

При расчете в наипростейшем варианте спектральной плотности ток-ток воспользуемся моделью идеального ферми-газа. Тогда, не повторяя оправдательных аргументов такой аппроксимации, приведенных в п. а), получим

$$\begin{aligned} J(j_q^+, j_q; \omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\hbar\omega t} \sum_{pp'} \langle \overline{a_{p-q/2}^+ a_{p+q/2} a_{p'+q/2}^+ a_{p'-q/2}} \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{p'+q/2} - \varepsilon_{p'-q/2})t} \frac{p_y p'_y}{m^2} = \\ &= \sum_p \frac{p_y^2}{m^2} n_{p-q/2} (1 - n_{p+q/2}) \delta(\omega + \varepsilon_{p+q/2} - \varepsilon_{p-q/2}), \end{aligned}$$

откуда

$$\langle \langle j_q | j_q^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\varepsilon} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J(j_q^+, j_q; \omega) (e^{\omega/\theta} - 1)}{\Omega - \omega + i\varepsilon} = \sum_p \frac{p_y^2}{m^2} \frac{n_{p+q/2} - n_{p-q/2}}{\Omega + \varepsilon_{p+q/2} - \varepsilon_{p-q/2} + i\varepsilon}.$$

В случае $\Omega = 0$ функция Грина $G_q = \langle \langle j_q | j_q^+ \rangle \rangle_{0+i\varepsilon}$ не имеет мнимой части, так как $(n_{p+q/2} - n_{p-q/2}) \delta(\varepsilon_{p+q/2} - \varepsilon_{p-q/2}) = 0$, знаменатель этой функции Грина равен

$\varepsilon_{p+q/2} - \varepsilon_{p-q/2} = \mathbf{pq}/m$, а числитель, имея в виду предельный переход $q \rightarrow 0$, целесообразно представить в виде разложения по четным степеням q . Так как

$$n \left(\frac{p^2}{2m} \pm \frac{\mathbf{pq}}{2m} + \frac{q^2}{8m} \right) = n_p + \frac{\partial n_p}{\partial E_p} \left(\pm \frac{\mathbf{pq}}{2m} + \frac{q^2}{8m} \right) + \frac{\partial^2 n_p}{\partial E_p^2} \cdot \frac{1}{2} \left(\pm \frac{\mathbf{pq}}{2m} \cdot \frac{q^2}{8m} + \left(\frac{\mathbf{pq}}{2m} \right)^2 + \left(\frac{q^2}{8m} \right)^2 \right) + \frac{\partial^3 n_p}{\partial E_p^3} \cdot \frac{1}{6} \left(\pm \left(\frac{\mathbf{pq}}{2m} \right)^3 + \dots \right),$$

то получаем, удваивая знакопеременные члены разложения величины $n_{p+q/2} - n_{p-q/2}$ и сокращая на \mathbf{pq}/m ,

$$G_q = \sum_p \frac{p_y^2}{m^2} \frac{n_{p+q/2} - n_{p-q/2}}{\mathbf{pq}/m} = \sum_p \frac{p_y^2}{m^2} \left\{ \frac{\partial n_p}{\partial E_p} + \frac{\partial^2 n_p}{\partial E_p^2} \cdot \frac{q^2}{8m} + \frac{\partial^3 n_p}{\partial E_p^3} \frac{(\mathbf{pq})^2}{24m^2} + O(q^4) \right\}.$$

Появление в этом разложении слагаемого, не зависящего от q^2 , настораживает, так как в основной формуле для $\mu(\mathbf{q}, \Omega)$ перед фигурной скобкой стоит множитель $1/q^2$, и предельный переход $q \rightarrow 0$ может оказаться бессмысленным. Однако, выделяя из функции G_q это слагаемое, получаем

$$\frac{1}{V} \sum_p \frac{p_y^2}{m^2} \frac{\partial n_p}{\partial E_p} = \frac{1}{Vm} \frac{2}{3} \sum_p E_p \frac{\partial n_p}{\partial E_p} = -\frac{1}{Vm} \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_p E_p n_p = \frac{1}{Vm} \frac{\partial \Omega(\theta, V, \mu)}{\partial \mu} = -\frac{N}{Vm}$$

(мы учли здесь, что $E_p = p^2/(2m)$, заменили под знаком суммы $p_y^2 \rightarrow p^2/3$ и учли, что для всех идеальных газов внутренняя энергия $\mathcal{E} = \sum_p E_p n_p$ связана с термодина-

мическим потенциалом $\Omega(\theta, V, \mu)$ соотношением $\Omega = -\frac{2}{3}\mathcal{E}$ (см. т. 2, гл. 2, § 2)), т. е. эта часть функции G_q полностью компенсируется членом n/m , стоящим в фигурных скобках в формуле для $\mu(\mathbf{q}, \Omega)$ на первом месте. Таким образом, чтобы решить задачу, остается рассмотреть величину

$$\frac{1}{V} G'_q = \frac{1}{V} \sum_p \left(\frac{\partial^2 n_p}{\partial E_p^2} \frac{q^2}{2m} + \frac{\partial^3 n_p}{\partial E_p^3} \frac{(\mathbf{pq})^2}{24m^2} \right) \frac{p_y^2}{m^2}.$$

Введем сферическую систему координат с полярной осью вдоль вектора $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$ (см. рис. 23). Тогда $p_y = p \sin \vartheta \cos \varphi$, $\mathbf{pq} = pq \cos \vartheta$.

Интегралы по углам ϑ и φ берутся элементарно:

$$\int_0^\pi \sin^2 \vartheta \cdot \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4}{3}; \quad \int_0^\pi \cos^2 \vartheta \sin^2 \vartheta \cdot \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4}{15}; \quad \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi = \pi.$$

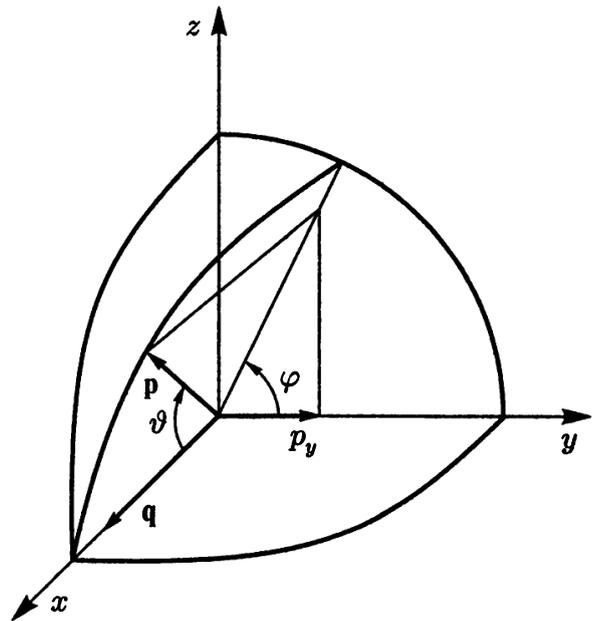


Рис. 23. К расчету интегралов по углам в выражении для функции G_q

Обозначив $p^2/(2m) = \varepsilon$ и перейдя к интегрированию по $d\varepsilon$, получаем

$$\frac{1}{V} G'_q = \frac{2 \cdot 4\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m)^{3/2} \frac{1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^{1/2} \frac{q^2}{12m^2} \varepsilon \left(\frac{\partial^2 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} + \frac{2}{15} \varepsilon \frac{\partial^3 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^3} \right).$$

Оставшийся интеграл упрощается сразу, если учесть очевидное соотношение

$$\int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^\alpha \frac{\partial^k n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^k} = -\alpha \int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^{\alpha-1} \frac{\partial^{k-1} n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^{k-1}}.$$

Делая под интегралом замены

$$\varepsilon^{5/2} \frac{\partial^3 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^3} \mapsto -\frac{5}{2} \varepsilon^{3/2} \frac{\partial^2 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2}; \quad \varepsilon^{3/2} \frac{\partial^2 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \mapsto -\frac{3}{2} \varepsilon^{1/2} \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}$$

и собирая численные коэффициенты, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} G'_q &= -\frac{q^2}{12m^2} \frac{2 \cdot 4\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m)^{3/2} \frac{1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^{1/2} \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \\ &= \frac{q^2}{12m^2} \frac{1}{V} \sum_p \left(-\frac{\partial n_p}{\partial E_p} \right) = \frac{q^2}{12m^2} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{V} \sum_p n_p = \frac{q^2}{12m^2} \frac{\partial n}{\partial \mu}. \end{aligned}$$

Замечая, что величину $\partial n/\partial \mu$ мы уже вычисляли в п. а),

$$\frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{\kappa^2}{4\pi e^2},$$

находим для искомой магнитной проницаемости выражение

$$\mu \Big|_{\substack{\Omega=0 \\ q \rightarrow 0}} = 1 - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{12m^2 c^2}.$$

Если ввести традиционную для магнитных задач величину магнетона Бора $\beta = \frac{e\hbar}{2mc}$, то для восприимчивости $\chi = \frac{\mu-1}{4\pi}$ получим, как и следовало ожидать, диамагнитный результат

$$\chi_{\text{диа}} = -\frac{1}{3} \beta^2 \frac{\partial n}{\partial \mu} = \begin{cases} -\frac{\beta^2 n}{2\varepsilon_F} \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \ll \varepsilon_F, \\ -\frac{\beta^2 n}{3\theta} \left(1 - \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\varepsilon_F}{\theta} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \gg \varepsilon_F, \end{cases}$$

полностью соответствующий диамагнитной восприимчивости Ландау идеального газа заряженных частиц. Однако обращает на себя внимание другое, как мог возникнуть подобный результат без традиционного при решении этой задачи и физически оправданного учета коренной перестройки характера движения и энергетического спектра заряженных частиц в магнитном поле (см. т. 2, гл. 2, задачи, § 3), а исключительно на основе плосковолнового по всем трем направлениям описания состояний газа этих частиц (этот «эффект» можно отнести к несомненным достоинствам общей формулы для $\mu(\mathbf{q}, \Omega)$).

Общая же восприимчивость «идеального» газа электронов определится как баланс полученных результатов в пользу парамагнитной его доли,

$$\chi = \chi_{\text{пара}} + \chi_{\text{диа}} = \frac{2}{3}\beta^2 \frac{\partial n}{\partial \mu}.$$

Чтобы рассмотреть динамическую спиновую восприимчивость, введем по аналогии с оператором плотности числа частиц $\rho(\mathbf{r})$ оператор плотности проекции на ось z собственного магнитного момента частиц системы

$$\beta m(\mathbf{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N} \beta \sigma_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad \int_{(V)} \beta m(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{1 \leq i \leq N} \beta \sigma_i,$$

и его фурье-образ в координатном и вторичнокантованном представлениях

$$m_q = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \beta m(\mathbf{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N} \sigma_i e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i}; \quad m_q = m_{-q}^+ = \sum_{\rho\sigma} \sigma a_{\rho+q,\sigma}^+ a_{\rho,\sigma}.$$

Представляя внешнее поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ в виде фурье-разложения по импульсам и частотам

$$H(\mathbf{r}, t) = \sum_{\Omega} \frac{1}{V} \sum_q H(\mathbf{q}, \Omega) e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\epsilon)t - \frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

запишем возмущающую систему часть гамильтониана в виде

$$\delta H(t) = \sum_{1 \leq i \leq N} -\beta \sigma_i H(\mathbf{r}_i, t) = \sum_{\Omega q} \delta H_{q\Omega},$$

выделив из нее отдельную гармонику

$$\delta H_{q\Omega} = -\frac{1}{V} \beta m_q^+ H(\mathbf{q}, \Omega) e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega+i\epsilon)t}.$$

Тогда на основании общих формул § 2 этой главы сразу получаем

$$M_z(\mathbf{q}, \Omega) = \delta \langle \beta m_q \rangle_t = \chi_{\text{пара}}(\mathbf{q}, \Omega) H(\mathbf{q}, \Omega),$$

где динамическая спиновая восприимчивость определяется функцией Грина типа момент-момент,

$$\chi_{\text{пара}}(\mathbf{q}, \Omega) = -\beta^2 \frac{1}{V} \langle \langle m_q | m_q^+ \rangle \rangle_{\Omega+i\epsilon}.$$

Проверим эту формулу на рассмотренном выше примере идеального ферми-газа. В случае $H_1 = 0$ средние значения рассчитываются с помощью теоремы о спариваниях, поэтому

$$\sigma\sigma' \langle a_{\rho+q,\sigma}^+ a_{\rho,\sigma} a_{\rho'-q',\sigma'}^+ a_{\rho',\sigma'} \rangle = \langle \overline{a_{\rho+q,\sigma}^+ a_{\rho,\sigma} a_{\rho'-q',\sigma'}^+ a_{\rho',\sigma'}} \rangle,$$

$\sigma\sigma' = \sigma^2 = 1$, и спектральная плотность момент-момент превращается в знакомую спектральную плотность типа плотность-плотность

$$J(m_q^+, m_q; \omega) = J(\rho_q^+, \rho_q; \omega),$$

Чтобы завершить данную задачу, превратив ее в исследование реакции на магнитное поле газа электронов, необходимо учесть вклад в восприимчивость, связанный с наличием у этих частиц собственного магнитного момента. В случае постоянного во времени магнитного поля $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ решение этой проблемы не требует использования метода функций Грина. Восстанавливая спиновый индекс (т. е. расшифровывая $p = (p, \sigma)$), имеем для гамильтониана системы

$$\mathcal{H} = \sum_{p\sigma} (E_p - (\mu + \sigma\beta H)) a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + H_1,$$

откуда для намагничивания системы получаем в соответствии с термодинамическими формулами

$$\begin{aligned} M &= -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial H} = \frac{\theta}{V} \frac{\partial}{\partial H} \ln \text{Sp} e^{-\mathcal{H}/\theta} = \frac{1}{V} \sum_{p\sigma} \beta \sigma \langle a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle = \\ &= \beta \frac{1}{V} \sum_p (n_{p+} - n_{p-}) = \beta \frac{N_+ - N_-}{V}, \end{aligned}$$

где N_+ и N_- — числа частиц со спином вверх (по полю \mathbf{H}) и вниз.

Рассматривая систему как двухкомпонентную, характеризуемую «химическими потенциалами» $\mu_+ = \mu + \beta H$ и $\mu_- = \mu - \beta H$, имеем

$$\Omega(\theta, V, \mu, H) = \Omega(\theta, V, \mu_+, \mu_-); \quad N_{\pm} = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_{\pm}}$$

с дополнительным условием

$$N_+ + N_- = N,$$

служащим для исключения из окончательных формул химического потенциала μ .

В рассматриваемом нами примере, когда мы аппроксимируем электронный газ идеальным ферми-газом (т. е. полагаем $H_1 = 0$) средние числа заполнения нам известны,

$$n \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \mp \beta H \right) = \frac{1}{\exp \left\{ \frac{1}{\theta} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \mp \beta H \right) \right\} + 1},$$

и дальнейшие расчеты уже не составляют труда. В случае $\beta H/\theta \rightarrow 0$, сохраняя линейную реакцию на наличие поля \mathbf{H} , имеем

$$n_{p\pm} = n_p \mp \frac{\partial n_p}{\partial E_p} \beta H + \dots,$$

откуда

$$M = H \beta^2 \frac{2}{V} \sum_p \left(-\frac{\partial n_p}{\partial E_p} \right) = H \beta^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{1}{V} \sum_{p\sigma} n_p = H \beta^2 \frac{\partial n}{\partial \mu},$$

и мы получаем окончательно для спиновой восприимчивости известный парамагнитный результат Паули (см. т. 2, гл. 2, задачи, § 3)

$$\chi_{\text{пара}} = \beta^2 \frac{\partial n}{\partial \mu} = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{\beta^2 n}{\epsilon_F} \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \ll \epsilon_F, \\ \frac{\beta^2 n}{\theta} \left(1 - \frac{2}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\epsilon_F}{\theta} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \gg \epsilon_F. \end{cases}$$

поэтому, используя обозначения и расчеты п. а), имеем

$$-\frac{1}{V} \langle \langle m_q | m_q^+ \rangle \rangle \Big|_{\substack{\Omega=0 \\ \mathbf{q} \rightarrow 0}} = f(\mathbf{q}) \Big|_{\mathbf{q} \rightarrow 0} = \frac{\partial n}{\partial \mu},$$

и мы сразу приходим к паулиевскому результату $\chi_{\text{пара}} = \beta^2 \partial n / \partial \mu$.

в) Электропроводность

Рассмотрим вновь систему заряженных частиц, находящихся в возмущающем ее равновесное состояние электростатическом поле \mathbf{E} , направленном вдоль оси β , где β — это x , y или z . Соответствующий этому возмущению электростатический потенциал мы уже вводили в п. а), посвященном диэлектрической проницаемости $\epsilon(\mathbf{q}, \Omega)$ этой системы. В разложенном по фурье-гармоникам виде мы представляли его как

$$\varphi^{(\beta)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\Omega} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega + i\varepsilon)t - \frac{i}{\hbar}\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

Так как $\mathbf{E}^{(\beta)} = -\nabla \varphi^{(\beta)}$, то любая компонента электростатического поля $E_{\alpha}^{(\beta)}$, где α — это x , y или z , будет, с одной стороны, содержать кронекеровскую функцию $\delta_{\alpha\beta}$, а с другой — будет равна взятому со знаком минус градиенту потенциала $\varphi^{(\beta)}$, что в импульсно-частотном представлении вместе будет выглядеть как

$$E_{\alpha}^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{i}{\hbar} q_{\alpha} \varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) = \delta_{\alpha\beta} E_{\beta}(\mathbf{q}, \Omega).$$

Возмущающая систему часть общего гамильтониана $\delta H(t)$ имеет вид, аналогичный рассмотренному в п. а), поэтому сразу выделим в нем необходимую отдельную гармонику

$$\delta H_{\mathbf{q}\Omega} = \frac{1}{V} e \varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) \rho_{\mathbf{q}}^+ e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega + i\varepsilon)t},$$

что приводит согласно теории возмущений (см. § 2, п. б)) сразу к токовой реакции системы на включение этого возмущения

$$\begin{aligned} I_{\alpha}^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) &= \delta \langle e j_{\alpha}(\mathbf{q}) \rangle_t = \frac{1}{V} \left\langle \langle e j_{\alpha}(\mathbf{q}) | e \varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) \rho_{\mathbf{q}}^+ \rangle \right\rangle_{\Omega + i\varepsilon} = \\ &= e^2 \varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\rho_{\mathbf{q}}^+, j_{\alpha}(\mathbf{q}); \omega) \frac{e^{\omega/\theta} - 1}{\Omega - \omega + i\varepsilon}, \end{aligned}$$

где $I_{\alpha}^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega)$ — гармоника плотности электрического тока в направлении α , если поле \mathbf{E} направлено по оси β , а в качестве оператора плотности потока числа частиц $\mathbf{j}(\mathbf{q})$ достаточно взять его не зависящую от потенциала внешнего поля часть $\mathbf{j}(\mathbf{q})$, использованную в п. б) этого параграфа.

Придадим этому соотношению, являющемуся, по существу, лишь полуфабрикатом, традиционную форму закона Ома:

$$I_{\alpha}^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) = \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega) E_{\beta}(\mathbf{q}, \Omega),$$

где $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega)$ — тензор динамической электропроводности системы. Для этого запишем стандартное уравнение непрерывности в импульсном представлении для

связывающую сопротивление среды (т. е. тепловые потери) с корреляцией токов (т. е. с флуктуационными процессами, приводящими к появлению теплового шума токов или ЭДС), что уже в чем-то напоминает формулу Найквиста.

Наконец, в случае воздействия на систему статического (т. е. в пределе $\Omega \rightarrow 0$) пространственно однородного (т. е. в пределе $q = 2\pi\hbar/\lambda \rightarrow 0$ или $\lambda \rightarrow \infty$) поля E_β , полагая $\sigma_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}\sigma$, имеем для статической проводимости σ (или обратной величины удельного сопротивления $\rho = 1/\sigma$)

$$\sigma = \frac{\pi e^2 \hbar}{\theta} \frac{1}{V} J(j_\beta^+(\mathbf{q}), j_\beta(\mathbf{q}); 0)_{q \rightarrow 0} = \frac{e^2}{2\theta} \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle j_\beta^+(\mathbf{q}) j_\beta(\mathbf{q}, t) \rangle_{q \rightarrow 0}.$$

Придадим полученной выше общей формуле для $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega)$ более элегантный вид, выделив из нее часть, обусловленную проводимостью свободного (т. е. без учета взаимодействия частиц друг с другом) электронного газа. Используя идеологию общего курса физики, можем написать для компонент силы $F_\alpha^{(\beta)}$, действующей на заряженную частицу

$$F_\alpha^{(\beta)} = m \dot{v}_\alpha^{(\beta)} = e E_\beta \delta_{\alpha\beta} e^{-\frac{i}{\hbar}(\Omega + i\varepsilon)t - \frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}.$$

Поэтому, учитывая, что в единице объема таких частиц будет $n = N/V$, получаем для амплитуды плотности тока

$$I_\alpha^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) = n e v_\alpha^{(\beta)} = i \frac{e^2 \hbar n}{m \Omega} \delta_{\alpha\beta} \cdot E_\beta = \sigma_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{q}, \Omega) E_\beta.$$

Покажем, что этот результат содержится в общей формуле для $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega)$ в пределе $\Omega \rightarrow \infty$ (точнее, $\Omega \gg \omega_{\text{рез}}$, когда спектральная плотность $J_q(\Omega) \cong 0$ и система ведет себя как изотропный идеальный газ). Имеем

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega) \Big|_{\Omega \rightarrow \infty} &\cong i \frac{e^2 \hbar}{\Omega} \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} J(j_\beta^+(\mathbf{q}), j_\alpha(\mathbf{q}); \omega) \frac{e^{\omega/\theta} - 1}{\omega} d\omega = \\ &= -i \frac{e^2 \hbar}{\Omega} \frac{1}{V} \langle \langle j_\alpha(\mathbf{q}) | j_\beta(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{0+i\varepsilon}. \end{aligned}$$

Вычислим появившуюся здесь «статическую» запаздывающую функцию Грина типа ток-ток в изотропном случае. Согласно гл. 2, § 2, имеем

$$G^{\text{ret}}(j_\alpha(\mathbf{q}, t), \rho^+(\mathbf{q}, \tau)) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - \tau) \langle [j_\alpha(\mathbf{q}, t), \rho^+(\mathbf{q}, \tau)]_- \rangle.$$

Действуя на обе части этого соотношения операцией $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \tau}$ и учитывая уравнение непрерывности для $\rho^+(\mathbf{q}, \tau)$, получаем:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \tau} G^{\text{ret}}(j_\alpha(\mathbf{q}, t), \rho^+(\mathbf{q}, \tau)) = -\delta(t - \tau) \langle [j_\alpha(\mathbf{q}), \rho^+(\mathbf{q})]_- \rangle + \sum_{\alpha'} q_{\alpha'} G^{\text{ret}}(j_\alpha(\mathbf{q}, t), j_{\alpha'}^+(\mathbf{q}, \tau)).$$

В энергетическом представлении это уравнение имеет вид

$$E \langle \langle j_\alpha(\mathbf{q}) | \rho^+(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} = \langle [j_\alpha(\mathbf{q}), \rho^+(\mathbf{q})]_- \rangle + \sum_{\alpha'} q_{\alpha'} \langle \langle j_\alpha(\mathbf{q}) | j_{\alpha'}^+(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{E+i\varepsilon}.$$

сопряженной фурье-компоненты плотности $\rho^+(\mathbf{q}, \Omega)$:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, \tau)}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \tau) = 0 \mapsto \frac{\partial \rho^+(\mathbf{q}, \tau)}{\partial \tau} + \sum_{\alpha'} \frac{i}{\hbar} q_{\alpha'} j_{\alpha'}^+(\mathbf{q}, \tau) = 0$$

и, умножив последнее равенство на оператор $j_{\alpha}(\mathbf{q}, t)$ справа, возьмем среднее значение от обеих частей этого равенства. Тогда получим связь двухвременных корреляционных функций типа плотность-ток и ток-ток

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \tau} \langle \rho^+(\mathbf{q}, \tau) j_{\alpha}(\mathbf{q}, t) \rangle = - \sum_{\alpha'} q_{\alpha'} \langle j_{\alpha'}^+(\mathbf{q}, \tau) j_{\alpha}(\mathbf{q}, t) \rangle,$$

которая в спектральном виде будет выглядеть как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-\frac{i}{\hbar} \omega(t-\tau)} \left\{ \omega J(\rho_q^+, j_{\alpha}(\mathbf{q}); \omega) + \sum_{\alpha'} q_{\alpha'} J(j_{\alpha'}^+(\mathbf{q}), j_{\alpha}(\mathbf{q}); \omega) \right\} = 0,$$

что позволяет исключить из полученной нами формулы для компоненты электрического тока $I_{\alpha}^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega)$ спектральную плотность $J(\rho_q^+, j_{\alpha}(\mathbf{q}); \omega)$,

$$I_{\alpha}^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) = - \sum_{\alpha'} e^2 q_{\alpha'} \varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(j_{\alpha'}^+(\mathbf{q}), j_{\alpha}(\mathbf{q}); \omega) \frac{e^{\omega/\theta} - 1}{\omega(\Omega - \omega + i\varepsilon)}.$$

Исключая из этого выражения компоненту потенциала $\varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega)$ с помощью соотношения

$$q_{\alpha'} \varphi^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega) = -i\hbar \delta_{\alpha'\beta} E_{\beta}(\mathbf{q}, \Omega),$$

что приводит к появлению в выражении для $I_{\alpha}^{(\beta)}(\mathbf{q}, \Omega)$ напряженности внешнего поля $E_{\beta}(\mathbf{q}, \Omega)$, получаем для тензора электропроводности $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega)$ выражение, обычно называемое флуктуационно-диссипационной теоремой или формулой Кубо, связывающей эту величину со спектральной плотностью типа ток-ток:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega) = ie^2 \hbar \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{\omega/\theta} - 1}{\omega(\Omega - \omega + i\varepsilon)} J(j_{\beta}^+(\mathbf{q}), j_{\alpha}(\mathbf{q}); \omega).$$

Отметим сразу некоторые очевидные следствия этой общей формулы, которые пригодятся при рассмотрении в конце этого пункта простых примеров ее использования. Прежде всего, заметим, что подынтегральное выражение не имеет полюса в точке $\omega = 0$.

Далее, так как

$$\operatorname{Re} \left(i \frac{1}{x + i\varepsilon} \right) = \pi \delta(x),$$

то действительная часть динамической проводимости $\sigma_{\alpha\beta}$ имеет безынтегральную структуру

$$\operatorname{Re} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega) = \pi e^2 \hbar \frac{e^{\Omega/\theta} - 1}{\Omega} \frac{1}{V} J(j_{\beta}^+(\mathbf{q}), j_{\alpha}(\mathbf{q}); \Omega),$$

Полагая $E = 0$ и учитывая, что в изотропном случае в сумме по α' останется только одно слагаемое $\alpha' = \alpha$, получаем для интересующей нас функции Грина

$$q_\alpha \langle \langle j_\alpha(\mathbf{q}) | j_\alpha^+(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{0+i\epsilon} = \langle [j_\alpha(\mathbf{q}), \rho^+(\mathbf{q})]_- \rangle = \left\langle \sum_{pp'} \frac{p_\alpha}{m} [a_{p+q/2}^+ a_{p-q/2}, a_{p'-q}^+ a_{p'}]_- \right\rangle.$$

Этот коммутатор мы фактически уже вычислили в § 5 этой главы, поэтому сразу имеем

$$\begin{aligned} \langle \langle j_\alpha(\mathbf{q}) | j_\alpha^+(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{0+i\epsilon} &= \frac{1}{q_\alpha} \left\langle \sum_p \frac{p_\alpha}{m} (a_{p+q/2}^+ a_{p+q/2} - a_{p-q/2}^+ a_{p-q/2}) \right\rangle = \\ &= \frac{1}{q_\alpha} \left(-\frac{q_\alpha}{m} \sum_p \langle a_p^+ a_p \rangle \right) = -\frac{N}{m}. \end{aligned}$$

Таким образом в предельном $\Omega \rightarrow \infty$ изотропном случае получаем:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega) \Big|_{\Omega \rightarrow \infty} = i \frac{e^2 \hbar n}{m\Omega} \delta_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{q}, \Omega).$$

Вычитая этот результат из интегральной части формулы для $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega)$ и прибавляя $\sigma_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{q}, \Omega)$ вне интеграла, получаем в результате значительное упрощение знаменателя подынтегрального выражения:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega) &= i \frac{e^2 \hbar n}{m\Omega} \delta_{\alpha\beta} + i e^2 \hbar \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(j_\beta^+(\mathbf{q}), j_\alpha(\mathbf{q}); \omega) \frac{e^{\omega/\theta} - 1}{\omega} \left(\frac{1}{\Omega - \omega + i\epsilon} - \frac{1}{\Omega + i\epsilon} \right) = \\ &= i \frac{e^2 \hbar n}{m\Omega} \delta_{\alpha\beta} + i \frac{e^2 \hbar}{\Omega} \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{J(j_\beta^+(\mathbf{q}), j_\alpha(\mathbf{q}); \omega) (e^{\omega/\theta} - 1)}{\Omega - \omega + i\epsilon}, \end{aligned}$$

позволяющее представить весь интеграл в виде запаздывающей функции Грина типа ток-ток. Таким образом, для тензора динамической электропроводности мы получаем окончательно второй вариант основной формулы:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega) = i \frac{e^2 \hbar n}{m\Omega} \delta_{\alpha\beta} + i \frac{e^2 \hbar}{\Omega} \frac{1}{V} \langle \langle j_\alpha(\mathbf{q}) | j_\beta^+(\mathbf{q}) \rangle \rangle_{\Omega+i\epsilon}.$$

Как и ранее, в п. а) и б), покажем, что полученные общие формулы (в данном случае — формула для $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \Omega)$), содержат в себе при самых грубых аппроксимациях известные результаты традиционной кинетической теории (см. т. 3).

Рассмотрим 1 см³ нашей проводящей системы и будем считать, что это кубик длиной 1 см с сечением 1 см² (любители навивать проволоку могут растянуть его в длину, но это в данном случае совершенно излишне). Тогда его сопротивление R будет равно

$$R = \rho V = \rho = \frac{1}{\sigma}.$$

Используя упрощенные обозначения, запишем закон Ома в виде

$$ej(\Omega) = \sigma(\Omega)E(\Omega),$$

где согласно следствию из основной формулы для проводимости в изотропном пространственно-однородном случае

$$\operatorname{Re} \sigma_{\alpha\alpha}(\Omega) \equiv \sigma(\Omega) = \pi e^2 \hbar J(\Omega) \frac{e^\Omega - 1}{\Omega} \frac{1}{V}$$

и где мы ввели упрощенное обозначение спектральной плотности, характеризующей корреляцию токов, $J(j_\alpha^+, j_\alpha; \Omega) \equiv J(\Omega)$. Отсюда имеем для нее

$$J(\Omega) = V \frac{\sigma(\Omega)}{\pi e^2 \hbar} \varepsilon_\Omega,$$

где возникшее здесь среднее значение энергии гармонического осциллятора электромагнитного поля (без энергии нулевых колебаний, см. т. 2, гл. 2, § 3) равно

$$\varepsilon_\Omega = \frac{\Omega}{e^{\Omega/\theta} - 1}.$$

При выводе традиционной (т. е. не обобщенной, а самой простой) формулы Найквиста (см. т. 3) из этой спектральной плотности выделяется с помощью специальных фильтров или мысленно спектральный интервал $\pm(\omega, \omega + \Delta\omega)$ чаще всего в области, где функция $J(\Omega)$ почти не отличается от значения $J(0)$ (см. рис. 24), который характеризуется уже «обрезанной» спектральной плотностью

$$\tilde{J}(\Omega) = \begin{cases} J(\omega) & \text{в случае } \omega \leq |\Omega| \leq \omega + \Delta\omega \\ 0 & \text{во всех других случаях.} \end{cases}$$

Тогда дисперсия плотности электрического тока в выделенном этим фильтром диапазоне частот $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ будет равна

$$\langle ej ej \rangle_{\Delta\omega} = \sigma^2(\omega) \langle E^2 \rangle_{\Delta\omega} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^2 \tilde{J}(\Omega) d\Omega = 2e^2 J(\omega) \Delta\omega \cong 2e^2 J(0) \Delta\omega,$$

и мы получаем формулу Найквиста для шума поля E (при «длине» образца в 1 см — это шум ЭДС) в полосе частот $\Delta\omega$

$$\langle E^2 \rangle_{\Delta\omega} = \frac{2\varepsilon_\omega R \Delta\omega}{\pi \hbar} = \frac{2}{\pi} \frac{\omega}{e^{\omega/\theta} - 1} \cdot \frac{\Delta\omega}{\hbar}.$$

Если интервал $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ выбран в релей-джинсовской области, т. е. в области низких частот, таких, что $\Omega/\theta \ll 1$, то мы получим изначальную формулу Найквиста

$$\langle E^2 \rangle_{\Delta\omega} = \frac{2\theta R}{\pi} \Delta\omega_{\text{кл.}}$$

Остановимся еще на одной простой иллюстрации, вытекающей из полученной общей формулы для проводимости. Покажем, что при самых грубых предположениях из нее следует известная формула Зоммерфельда для проводимости σ (см. т. 3, гл. 5, задачи, § 3).

Так как согласно выводам квантовой механики периодическое поле, создаваемое идеальной ионной решеткой, не рассеивает электронов, то существование сопротивления у реальных металлов связывается с их рассеянием на нарушениях строгой периодичности поля ионного остова, связанных с неизбежными примесями, дислокациями в самой решетке и с ее тепловыми колебаниями. Будем полагать, что

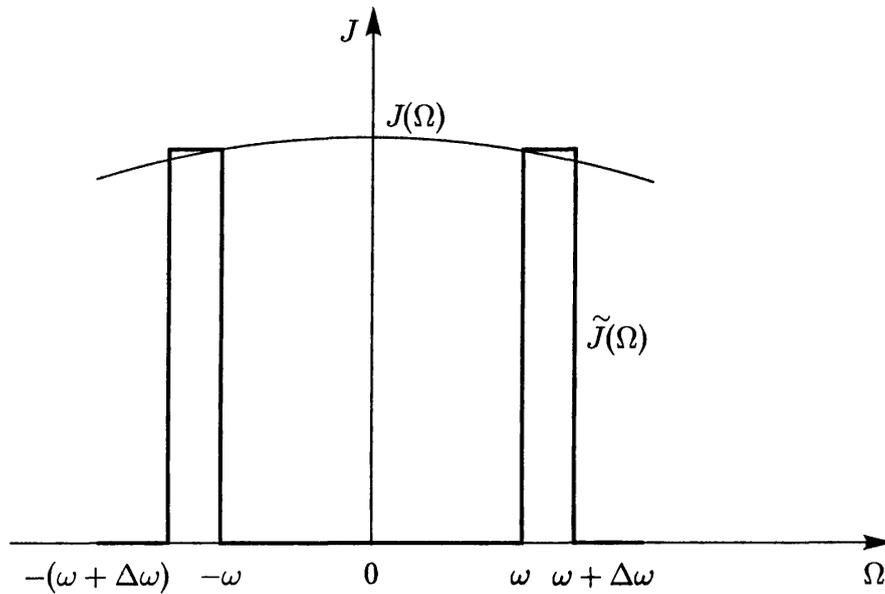


Рис. 24. Выделение полосы частот из спектральной плотности корреляционной функции токов $J(\Omega)$ при выводе формулы Найквиста

исследование этих процессов проведено отдельно и затухание электронной волны в каком-либо варианте уже определено, а вместо блоховской функции, как это почти всегда на практике делается, используется привычная плоская волна, характеризующаяся соответственно подобранной эффективной массой m . Тогда в этом квазистационарном (в квантово-механическом смысле) приближении вместо незатухающей блоховской волны возникает конструкция

$$\Psi_p(\mathbf{r}, t) \longrightarrow \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E(p)t - \frac{1}{\hbar} \Gamma_p |t| \right\},$$

где $E(p) = p^2/(2m)$, а величину Γ_p можно было бы определить, решая отдельную самостоятельную задачу по расчету одночастичной функции Грина $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$, выделяя в ней структуру

$$\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon} \sim \frac{1}{E - \epsilon_p + i\Gamma_p},$$

имеющую физический смысл в случае $\Gamma_p \ll E_p$, или, что то же самое, выделяя в спектральной плотности $J(a_p^+, a_p; \omega)$ резонанс в области $\omega \cong \epsilon_p$,

$$J(a_p^+, a_p; \omega) \cong n_p \tilde{\delta}(\epsilon_p - \omega) = n_p \cdot \frac{\Gamma_p}{\pi} \frac{1}{(\omega - \epsilon_p)^2 + \Gamma_p^2}.$$

С точки зрения электронных операторов a_p и a_p^+ , эта идеология квазистационарных состояний формально эквивалентна соответствующему изменению их временных квазигейзенберговских (см. гл. 2) зависимостей

$$a_p(t) \mapsto a_p e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_p t - \frac{1}{\hbar} \Gamma_p |t|}, \quad a_p^+(t) \mapsto a_p^+ e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon_p t - \frac{1}{\hbar} \Gamma_p |t|},$$

где $\epsilon_p = p^2/(2m) - \mu$.

Рассчитаем теперь в этом простом, но физически осмысленном приближении статическую ($\Omega = 0$) электропроводность σ пространственно однородной ($q \rightarrow 0$) системы. Чтобы избавиться от забот, связанных с учетом модуля $|t|$, запишем формулу

для σ , используя свойство корреляционных функций $\langle BA(t) \rangle = \langle B(-t)A \rangle$, в виде, содержащем интегрирование только по области $t > 0$,

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{e^2}{2\theta V} \lim_{q \rightarrow 0} \int_0^{\infty} dt \left(\langle j_x^+(\mathbf{q}) j_x(\mathbf{q}, t) \rangle + \langle j_x^+(\mathbf{q}, t) j_x(\mathbf{q}) \rangle \right) = \\ &= \frac{e^2}{2\theta V} \sum_{pp'} \frac{p_x p'_x}{m^2} \int_0^{\infty} dt \lim_{q \rightarrow 0} \left(\langle a_{p'-q/2}^+ a_{p'+q/2} a_{p+q/2}^+(t) a_{p-q/2}(t) \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \langle a_{p-q/2}^+(t) a_{p+q/2}(t) a_{p'+q/2}^+ a_{p'-q/2} \rangle \right). \end{aligned}$$

Вводя явную зависимость операторов $a_{p \pm q/2}^+$ и $a_{p \mp q/2}$ от времени и учитывая, что $(\epsilon_{p+q/2} - \epsilon_{p-q/2})_{q=0} = 0$, получаем выражение, содержащее средние значения от четверок не зависящих от времени операторов, расчет которых можно произвести в нашем грубом приближении на основе теоремы о спариваниях (т. е. в приближении идеального газа),

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{e^2}{2\theta V} \sum_{pp'} \frac{p_x p'_x}{m^2} \times \\ &\quad \times \int_0^{\infty} dt e^{-\frac{1}{\hbar} 2\Gamma_p t} \lim_{q \rightarrow 0} \left(\langle \overbrace{a_{p'-q/2}^+ a_{p'+q/2} a_{p+q/2}^+ a_{p-q/2}} \rangle + \langle \overbrace{a_{p-q/2}^+ a_{p+q/2} a_{p'+q/2}^+ a_{p'-q/2}} \rangle \right). \end{aligned}$$

В результате этой операции в двойной сумме останутся только слагаемые с $p' = p$. Учитывая, что для идеального ферми-газа

$$\frac{\partial n_p}{\partial E_p} = -\frac{1}{\theta} n_p (1 - n_p),$$

и совершая стандартную замену под знаком суммы

$$p_x^2 \mapsto \frac{1}{3} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{2}{3} m E_p,$$

получаем

$$\sigma = \frac{2}{3} \frac{e^2}{m\theta V} \sum_p n_p (1 - n_p) \frac{p^2}{2m} \frac{\hbar}{2\Gamma_p} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{m V} \sum_p \left(-\frac{\partial n_p}{\partial E_p} \right) E_p \frac{\hbar}{2\Gamma_p}.$$

В вырожденном случае $\theta \ll \epsilon_F$ производная $(-\partial n_p / \partial E_p)$ слегка размытой единичной ферми-ступеньки сосредоточена около значения $E_p = \mu$,

$$-\frac{\partial n_p}{\partial E_p} \cong \delta(E_p - \mu),$$

и если, как это имеет место в упомянутых выше случаях, затухание Γ_p не исчезает на границе Ферми, то величину $\hbar / (2\Gamma_p)$, взятую в точке $p = p_F$, можно вынести за знак суммы по p .

То же можно сделать и в случае $\theta \gg \epsilon_F$, если только $\Gamma_p \cong \text{const}$ во всей реальной области интегрирования $0 \leq |\mathbf{p}| < \sqrt{3m\theta}$, определяемой максвелловским

распределением (в иных случаях необходимы, конечно, соответствующие уточнения). Тогда в обоих этих приближениях имеем

$$\sigma = \frac{e^2 \hbar}{m 2\Gamma} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{2}{3} \sum_p n_p E_p \right) = \frac{e^2 \hbar}{m 2\Gamma} \frac{1}{V} \left(- \frac{\partial \Omega(\theta, V, \mu)}{\partial \mu} \right) = \frac{e^2 n \hbar}{m 2\Gamma},$$

где $n = N/V$ — плотность числа электронов в системе и $\Gamma = \tilde{\Gamma}_p$ — эффективная величина затухания электронной волны $\Psi_p(\mathbf{r}, t)$.

Полученный результат для σ полностью совпадает с формулой Зоммерфельда, если положить в ней кинетический параметр τ , характеризующий время релаксации одночастичной функции распределения (определяемой согласно § 4, гл. 1 средним значением от произведения двух полевых операторов) к равновесному ее значению, равным $\hbar/(2\Gamma)$ (см. т. 3, гл. 5, задачи, § 3).

Так как реальный электронный газ всегда является вырожденным, то вынесение величины $\hbar/(2\Gamma_p)$ за знак суммы по p в точке $p = p_F$ является с точностью до температурных поправок, пропорциональных $(\theta/\epsilon_F)^2$, вполне оправданным. В случаях, когда рассеяние электронов происходит на малоподвижных или тяжелых центрах, на атомах примеси, дислокациях и ионах решетки при температурах выше дебаевской $\theta > \theta_D$ (при которых электронный газ все еще остается вырожденным, $\theta_D \ll \epsilon_F$), когда в тепловое движение вовлечены все ионы решетки и рассеяние электронов происходит на каждом из них независимо, величину $\hbar/(2\Gamma)$ можно считать несущественно зависящей от температуры и аппроксимировать ее константой, что вполне оправдывается на практике.

В области же низких температур по сравнению с дебаевской температурой θ_D ситуация меняется: электроны рассеиваются не на отдельных ионах, а на длинноволновых колебаниях кристаллической решетки, плотность которых достаточно быстро убывает при стремлении температуры системы к нулю. Это взаимодействие электронов с колебаниями решетки (т. е. фононами) в низкотемпературной области, когда их еще мало, как мы показали в гл. 1, § 3, п. о), можно характеризовать гамильтонианом

$$H_1 = \sum_p \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q \Phi(q) (\rho_q^+ b_q^+ + \rho_q b_q),$$

где b_q^+ и b_q — операторы рождения и уничтожения фононов, а амплитуда электрон-фононного взаимодействия $\Phi(q)$ пропорциональна \sqrt{q} .

Чтобы оценить вклад в удельное сопротивление $\rho = 1/\sigma$ этих процессов рассеяния, достаточно рассчитать в борновском приближении квантово-механическую вероятность перехода электрона, находящегося в зоне размытия границы Ферми, под действием возмущения H_1 из первоначального состояния в любое другое (в нашем случае — это как раз величина $2\Gamma/\hbar$). Эти расчеты достаточно подробно выполнены и прокомментированы в т. 3, гл. 5, § 7, п. в).

Точно решаемые системы и физические задачи, сводимые к ним

§ 1. Общая квадратичная форма в качестве гамильтониана точно исследуемой статистической системы

Модельные системы, для которых все основные расчеты удастся провести до конца без привлечения ограничивающих область применения полученных результатов предположений (такие системы часто называют точно решаемыми), несмотря на их немногочисленность, всегда украшают любую теорию. В статистической физике примерами таких систем являются идеальные газы, т. е. системы без динамического взаимодействия составляющих их частиц, теоретическое рассмотрение которых, являющееся достоянием первой половины XX в., достаточно полно изложено в т. 2, гл. 2, и мы будем полагать результаты исследований этих систем как бы базовыми и хорошо известными.

С откровенно практической точки зрения идеальная система — это система, характеризующаяся гамильтонианом, представляющим собой диагональную квадратичную форму относительно операторов рождения и уничтожения (см. § 3), показательный пример которой был рассмотрен в конце гл. 2. Развивая ту же идею, рассмотрим теперь более общий случай, когда гамильтониан системы имеет вид общей квадратичной формы по указанным операторам, и покажем, что система, характеризующаяся таким гамильтонианом, является точно решаемой (т. е. сводится к проблеме рассмотрения соответствующего идеального газа).

Итак, рассмотрим гамильтониан следующего вида:

$$H = \sum_{pp'} \{ A(p, p') a_p^+ a_{p'} + B(p, p') a_p a_{p'} + B^*(p, p') a_p^+ a_{p'}^+ \},$$

где операторы бозе- или ферми-типа (соответственно верхний или нижний знак) удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[a_p, a_{p'}^+]_{\mp} = \Delta(p - p'), \quad [a_p, a_{p'}]_{\mp} = 0, \quad [a_p^+, a_{p'}^+]_{\mp} = 0,$$

а коэффициенты $A(p, p')$ и $B(p, p')$ обеспечивают эрмитовость ($H^+ = H$) рассматриваемого гамильтониана,

$$A^+(p', p) = A^*(p, p') = A(p, p'), \quad B(p, p') = \pm B(p', p).$$

Первое, что приходит в голову, — это традиционный квантово-механический метод: приведение данной формы к диагональному виду с сохранением типа статистики. Несмотря на определенную занудность этой процедуры (которую хотя бы раз в жизни необходимо преодолеть каждому), она достаточно поучительна, и мы остановимся на ней, выбрав наиболее рациональный вариант ее изложения.

а) Диагонализация гамильтониана H

Конечная цель предлагаемой процедуры состоит в том, чтобы придать рассматриваемому гамильтониану форму гамильтониана идеального бозе- или ферми-газа, (в соответствии с исходной моделью):

$$H = \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} \xi_{\mu}^{+} \xi_{\mu} + E_0,$$

что будет означать, прежде всего, полное решение квантово-механической задачи, так как мы будем знать структуру новых ξ -операторов (т. е. их выражение через суперпозицию привычных операторов a_p и a_p^{+} в импульсном варианте представления вторичного квантования), спектр энергий ε_{μ} возбужденных состояний системы $\xi_{\mu}^{+}|0\rangle$ и энергию E_0 основного ее состояния $|0\rangle$, такого, что $\xi_{\mu}|0\rangle = 0$, и, во-вторых, мы будем знать все макроскопические характеристики системы, характерные и хорошо изученные для идеальных систем, гамильтонианы которых представляют диагональные квадратичные формы относительно бозе- или ферми-операторов рождения и уничтожения.

Для достижения поставленной цели необходимо сначала подвергнуть исходные операторы a_p и a_p^{+} линейному преобразованию общего вида (оно сохраняет квадратичную структуру гамильтониана)

$$\begin{cases} a_p = \sum_{\mu} u(\mu, p) \xi_{\mu} + v^{*}(\mu, p) \xi_{\mu}^{+}, \\ a_p^{+} = \sum_{\mu} u^{*}(\mu, p) \xi_{\mu}^{+} + v(\mu, p) \xi_{\mu}, \end{cases} \quad (*)$$

потребовав при этом, чтобы тип статистики новых ξ -операторов совпадал бы с типом статистики исходных (т. е. преобразование $a \rightarrow \xi$ было бы каноническим),

$$[\xi_{\mu}, \xi_{\mu'}^{+}]_{\mp} = \Delta(\mu - \mu'), \quad [\xi_{\mu}, \xi_{\mu'}]_{\mp} = [\xi_{\mu}^{+}, \xi_{\mu'}^{+}]_{\mp} = 0.$$

Воспользовавшись соотношениями (*) тогда имеем

$$[a_p, a_{p'}^{+}]_{\mp} = \Delta(p - p') = \sum_{\mu\mu'} u(\mu, p) u^{*}(\mu', p') [\xi_{\mu}, \xi_{\mu'}^{+}]_{\mp} + v^{*}(\mu, p) v(\mu', p') [\xi_{\mu}^{+}, \xi_{\mu'}]_{\mp},$$

$$[a_p, a_{p'}]_{\mp} = 0 = \sum_{\mu\mu'} u(\mu, p) v^{*}(\mu', p') [\xi_{\mu}, \xi_{\mu'}^{+}]_{\mp} + v^{*}(\mu, p) u(\mu', p') [\xi_{\mu}^{+}, \xi_{\mu'}]_{\mp},$$

откуда сразу следуют дополнительные кинематические условия на коэффициенты общего $(u-v)$ -преобразования (*):

$$\begin{cases} \Delta(p - p') = \sum_{\mu} u(\mu, p) u^{*}(\mu, p') \mp v^{*}(\mu, p) v(\mu, p'), \\ 0 = \sum_{\mu} u(\mu, p) v^{*}(\mu, p') \mp v^{*}(\mu, p) u(\mu, p'). \end{cases} \quad (\Upsilon)$$

Далее следовало бы подставить формулы (*) в исходный гамильтониан и, сгруппировав его члены, потребовать, чтобы в новых ξ -операторах он имел бы диагональную структуру, что и определило бы основные уравнения для коэффициентов преобразования (*).

Можно, однако, воспользоваться более экономным приемом, введя в рассмотрение условия обратимости преобразования (*),

$$\begin{cases} \Delta(\mu - \mu') = \sum_p u^*(\mu', p)u(\mu, p) \mp v^*(\mu', p)v(\mu, p), \\ 0 = \sum_p u^*(\mu', p)v^*(\mu, p) \mp v^*(\mu', p)u^*(\mu, p). \end{cases} \quad (\Upsilon')$$

Тогда, умножив первое из соотношений (*) на $u^*(\mu', p)$, а второе — на $\mp v^*(\mu', p)$ и суммируя по величине p ,

$$\sum_p \begin{cases} u^*(\mu', p)a_p = \sum_{\mu} u^*(\mu', p)u(\mu, p)\xi_{\mu} + u^*(\mu', p)v^*(\mu, p)\xi_{\mu}^+, \\ \mp v^*(\mu', p)a_p^+ = \sum_{\mu} \mp v^*(\mu', p)v(\mu, p)\xi_{\mu} \mp v^*(\mu', p)u^*(\mu, p)\xi_{\mu}^+, \end{cases}$$

получим согласно условиям обратимости (Υ') обратное по отношению к (*) преобразование, определяемое теми же коэффициентами u и v

$$\begin{cases} \xi_{\mu} = \sum_p u^*(\mu, p)a_p \mp v^*(\mu, p)a_p^+, \\ \xi_{\mu}^+ = \sum_p u(\mu, p)a_p^+ \mp v(\mu, p)a_p, \end{cases} \quad (*')$$

по отношению к которому условия (Υ') являются условиями каноничности данного преобразования.

С геометрической точки зрения ($u-v$)-преобразования (*)-(Υ) и (*')-(Υ') представляют поворот в пространстве N -частичных функций с заданным типом симметрии, и наша задача состоит в том, чтобы осуществить этот поворот так, чтобы в новом базисе рассматриваемый гамильтониан H сделался бы диагональным, т. е. его собственные функции стали бы служить новыми базисными N -частичными функциями того же типа симметрии относительно перестановок индексов частиц, что и функции исходного базиса, построенного нами в гл. 1, § 3 в виде соответствующих произведений плоских волн.

Преобразуем теперь ожидаемый диагонализированный вариант квадратичной формы с помощью обратного преобразования (*') к исходным операторам a_p и a_p^+ . Исключая операторы ξ_{μ}^+ и ξ_{μ} с помощью (*') и переставляя местами в соответствии с типом статистики операторы $a_p a_{p'}^+ = \pm a_{p'}^+ a_p + \Delta(p - p')$, имеем

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} \xi_{\mu}^+ \xi_{\mu} &= \sum_{pp'} \left\{ \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} [u(\mu, p)u^*(\mu, p') \pm v^*(\mu, p)v(\mu, p')] a_p^+ a_{p'} \mp \right. \\ &\mp \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} v(\mu, p)u^*(\mu, p') a_p a_{p'} \mp \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} v^*(\mu, p')u(\mu, p) a_p^+ a_{p'}^+ \left. \right\} + \sum_p \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} v(\mu, p)v^*(\mu, p) = \\ &= \sum_{pp'} \{ A(p, p') a_p^+ a_{p'} + B(p, p') a_p a_{p'} + B^*(p, p') a_p^+ a_{p'}^+ \} + \sum_p \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} v(\mu, p)v^*(\mu, p), \end{aligned}$$

откуда из сопоставления с исходной формулой для гамильтониана H следуют основные уравнения для коэффициентов ($u-v$)-преобразования и собственных значений ε_{μ}

оператора H ,

$$\begin{aligned} A(p, p') &= A^*(p, p') = \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} [u(\mu, p)u^*(\mu, p') \pm v^*(\mu, p)v(\mu, p')], \\ B^*(p, p') &= \pm B^*(p', p) = \mp \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} u(\mu, p)v^*(\mu, p'), \\ B(p, p') &= \pm B(p', p) = \mp \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} u^*(\mu, p')v(\mu, p), \end{aligned}$$

которые надо решать совместно с условиями каноничности (γ'), а также выражение для энергии основного состояния системы

$$E_0 = \langle 0|H|0\rangle = - \sum_p \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} |v(\mu, p)|^2.$$

Придадим этим уравнениям с помощью соотношений (γ') вид линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов ($u-v$)-преобразования, разрешенных относительно собственных значений гамильтониана ε_{μ} , т. е., как говорят в подобных случаях, вид «секулярных» уравнений.

Умножая первое из полученных уравнений на $u(\mu', p')$, а второе — на $v(\mu', p')$ и суммируя по p' , получаем, манипулируя соотношениями (γ'),

$$\begin{aligned} \sum_{p'} A(p, p')u(\mu', p') &= \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} u(\mu, p) \sum_{p'} [u(\mu', p')u^*(\mu, p') \mp v(\mu', p')v^*(\mu, p')] \pm \\ &\pm \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} u(\mu, p) \sum_{p'} v(\mu', p')v^*(\mu, p') \pm \\ &\pm \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} v^*(\mu, p) \sum_{p'} v(\mu, p')u(\mu', p') = \varepsilon_{\mu'} u(\mu', p) - \sum_{p'} 2B^*(p, p')v(\mu', p'). \end{aligned}$$

Если же первое из полученных уравнений умножить на $v(\mu', p)$, а третье — на $u(\mu', p)$ и просуммировать по p , то аналогичным путем придем к соотношению

$$\begin{aligned} \sum_p A(p, p')v(\mu', p) &= \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} u^*(\mu, p') \sum_p u(\mu, p)v(\mu', p) - \\ &- \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} v(\mu, p') \sum_p [\mp v^*(\mu, p)v(\mu', p) + u^*(\mu, p)u(\mu', p)] + \\ &+ \sum_p \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} u^*(\mu, p)v(\mu, p')u(\mu', p) = -\varepsilon_{\mu'} v(\mu', p') - \sum_p 2B(p, p')u(\mu', p). \end{aligned}$$

Убирая ненужные штрихи у слагаемых вне сумм и заменяя во втором слагаемом последнего соотношения $p \leftrightarrow p'$, получаем искомые линейные уравнения в окончательном виде

$$\varepsilon_{\mu} u(\mu, p) = \sum_{p'} \{A(p, p')u(\mu, p') + 2B^*(p, p')v(\mu, p')\}, \quad (I)$$

$$-\varepsilon_{\mu} v(\mu, p) = \sum_{p'} \{A(p', p)v(\mu, p') + 2B(p', p)u(\mu, p')\}, \quad (II)$$

которые, естественно, необходимо рассматривать совместно с условиями (γ') или (γ) (эти условия, кстати, исключают тривиальное решение однородной системы $u = v = 0$).

Подведем итоги проведенной процедуры.

Во-первых, в новых ξ -операторах мы получим

$$H = E_0 + \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu} \xi_{\mu}^{+} \xi_{\mu}, \quad E_0 = - \sum_{\mu} \sum_p \varepsilon_{\mu} |v(\mu, p)|^2,$$

т. е. при условии, что величины ε_{μ} и $v(\mu, p)$ известны, статистическая часть проблемы решена полностью, так как она сведена к рассмотрению соответствующей идеальной бозе- или ферми-системы.

Во-вторых, полученная однородная система уравнений I–II относительно коэффициентов линейного преобразования исходных операторов (*) (или (*')) имеет нетривиальное решение в случае, когда составленный из коэффициентов при неизвестных величинах $u(\mu, p)$ и $v(\mu, p)$ (т. е. из величин $A(p, p')$, $B(p, p')$, входящих в исходный гамильтониан, и энергии ε , стоящей в левой части этих уравнений) детерминант равен нулю,

$$\Delta(\varepsilon) = 0.$$

Решение этого алгебраического уравнения определяет спектр собственных значений исходного гамильтониана (т. е. энергии возбужденных состояний системы над основным).

В-третьих, решая для каждого значения ε_{μ} уравнения I–II относительно $u(\mu, p)$ и $v(\mu, p)$, мы помимо результата для энергии основного состояния E_0 определим также и структуру возбужденных состояний, являющихся в соответствии с обобщенным фурье-преобразованием (*') определенной суперпозицией плоских волн, что представляет интерес уже с точки зрения физической интерпретации этих возбуждений.

Естественно, что второй и третий из указанных выше моментов исследования представляют основную математическую трудность, которая без особых затрат преодолевается лишь при рассмотрении несложных физических моделей.

б) Метод функций Грина

Решим ту же задачу, используя изложенный в гл. 2 метод двухвременных функций Грина. Располагая гамильтонианом в виде общей квадратичной формы относительно операторов рождения и уничтожения

$$H = \sum_{p p'} \{ A(p, p') a_p^{+} a_{p'} + B(p, p') a_p a_{p'} + B^{*}(p, p') a_p^{+} a_{p'}^{+} \},$$

замечаем, что для расчета, например, внутренней энергии такой системы $\mathcal{E} = \langle H \rangle$ необходимо располагать спектральными плотностями двух видов, определяющими средние величины $\langle a_p^{+} a_{p'} \rangle$ и $\langle a_p a_{p'} \rangle = \langle a_p^{+} a_{p'}^{+} \rangle^{*}$, а значит, и двумя соответствующими функциями Грина. Так как уравнение для функций Грина в общем случае

$$\mathcal{E} \langle \langle A|B \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \langle AB - \eta BA \rangle + \langle \langle [A, H]_- | B \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$$

включает в правой части коммутатор с гамильтонианом, рассчитаем простейший его вариант

$$[a_p, H]_- = \sum_{p'' p'} \{ A(p'', p') [a_p, a_{p''}^{+} a_{p'}]_- + B^{*}(p'', p') [a_p, a_{p''}^{+} a_{p'}^{+}]_- \}.$$

Учитывая, что $a_p a_{p'}^+ = \pm a_{p'}^+ a_p + \Delta(p'' - p)$, после несложных перестановок оператора a_p получаем, во-первых,

$$[a_p, H]_- = \sum_{p'} \{A(p, p') a_{p'} + 2B^*(p, p') a_{p'}^+\}$$

и, во-вторых, аналогичное соотношение для коммутатора $[a_p^+, H]_-$:

$$[a_p^+, H]_- = -([a_p, H]_-)^+ = - \sum_{p'} \{A(p', p) a_{p'}^+ + 2B(p', p) a_{p'}\}.$$

Выбирая операторы A и B в двух вариантах: $A_1 = a_p$, $B = a_q^+$ и $A_2 = a_p^+$, $B = a_q^+$, и делая рациональный выбор числа $\eta = \pm 1$ так, чтобы в бозе- и ферми-случаях

$$\langle a_p a_q^+ \mp a_q^+ a_p \rangle = \Delta(p - q), \quad \langle a_p^+ a_q^+ \mp a_q^+ a_p^+ \rangle = 0,$$

получаем сразу замкнутую систему двух уравнений для функций Грина $\langle\langle a_p | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ и $\langle\langle a_p^+ | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ (в бозе-случае — коммутационного, а в ферми-случае — антикоммутационного типов) в виде

$$\mathcal{E} \langle\langle a_p | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \Delta(p - q) + \sum_{p'} \{A(p, p') \langle\langle a_{p'} | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} + 2B^*(p, p') \langle\langle a_{p'}^+ | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}\}, \quad (1)$$

$$-\mathcal{E} \langle\langle a_p^+ | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = 0 + \sum_{p'} \{A(p', p) \langle\langle a_{p'}^+ | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} + 2B(p', p) \langle\langle a_{p'} | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}\}. \quad (2)$$

Структура этих уравнений практически та же, что у полученных ранее уравнений (I) и (II) для коэффициентов линейного $(u-v)$ -преобразования, но с существенным отличием: система линейных уравнений для функций Грина (1) и (2) является неоднородной и не требует каких-либо дополнений типа условий (Υ'). Именно, процедура диагонализации привела к уравнениям (I) и (II) для коэффициентов $(u-v)$ -преобразования, которые можно условно изобразить как

$$L_1(u(\mu, p), v(\mu, p); E) = 0, \quad (I)$$

$$L_2(u(\mu, p), v(\mu, p); E) = 0, \quad (II)$$

нетривиальное решение которых, полученное с учетом условий каноничности преобразований (Υ'), определялось требованием

$$\Delta(E) = 0,$$

являющимся уравнением для собственных значений исходного оператора Гамильтона H .

Метод функций Грина привел к системе уравнений (1) и (2) вида

$$L_1(\langle\langle a_p | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}, \langle\langle a_p^+ | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}; \mathcal{E}) = \Delta(p - q), \quad (1)$$

$$L_2(\langle\langle a_p | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}, \langle\langle a_p^+ | a_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}; \mathcal{E}) = 0, \quad (2)$$

где L_1 и L_2 — в точности те же самые линейные формы, что и в уравнениях (I) и (II). Структура этих уравнений практически та же, что и у полученных нами уравнений для коэффициентов линейного $(u-v)$ -преобразования, но с существенным отличием: система линейных уравнений (1) и (2) является неоднородной и не требует каких-либо дополнений типа условий (Υ').

В соответствии с правилами линейной алгебры решения системы уравнений (1) и (2) имеют вид

$$\langle \langle a_p^{(+)} | a_q^{+} \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \frac{M}{\Delta(\mathcal{E})},$$

где $\Delta(\mathcal{E})$ — все тот же детерминант, составленный из коэффициентов однородной системы уравнений, а M — аналогичный детерминант, в котором столбец, состоящий из коэффициентов $(A(p, p') - \mathcal{E})$ при функциях Грина $\langle \langle a_p | a_q^{+} \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$ (или коэффициент $(A(p', p) + \mathcal{E})$ при функциях $\langle \langle a_p^{+} | a_q^{+} \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$) заменен на $\Delta(p - q)$ (т. е. на единицу и нули). Таким образом, мы попутно доказали, что нули знаменателя функций Грина в энергетическом представлении определяют спектр собственных частот (т. е. энергий возбужденных состояний) рассматриваемой системы.

Оба подхода к исследованиям точно решаемой системы, задаваемой гамильтонианом H , конечно же, эквивалентны, хотя метод, использующий функции Грина, внешне выглядит намного привлекательнее и проще (для составления уравнений достаточно было рассчитать всего лишь один коммутатор $[a_p, H]_-$). В дальнейшем мы будем использовать оба этих приема исследования, что внесет определенное разнообразие в изложение конкретных разработок.

§ 2. Вырожденный неидеальный бозе-газ и концепция приближенного вторичного квантования по Боголюбову

Проблема теоретического объяснения достаточно полно и достоверно выявленных на многочисленных экспериментах особенностей жидкого гелия, обладающего ниже температуры λ -перехода совершенно уникальными свойствами и представляющего, по существу, пример единственной существующей в земных условиях квантовой бозе-жидкости, т. е. существенно неидеальной вырожденной бозе-системы, возникшая на ранних стадиях еще в 1938 г., до сих пор, несмотря на целый ряд относительно успешных полуфеноменологических исследований этих особенностей, встречает серьезные трудности.

Как мы уже указывали в гл. 1, § 3, п. п), в динамическом плане эти трудности связаны с особенностями взаимодействия атомов гелия и плотностными характеристиками его жидкой фазы: это — плотная в сравнении с радиусом взаимодействия атомов гелия система, $R_0 \gtrsim a = \sqrt[3]{V/N}$, с относительно большим радиусом интенсивного отталкивания атомов друг от друга, $2r_0 \lesssim a$, и неглубокой, но протяженной зоной притяжения, недостаточной для образования связанных состояний атомов гелия, но зато обеспечивающей его незамерзающее в кристалл жидкое состояние вплоть до абсолютного нуля температуры (см. т. 2). Именно эта соразмерность величины среднего расстояния между атомами a с размером самого атома $2r_0$ и радиусом взаимодействия R_0 потенциала $\Phi(R)$ не позволяет ввести разумный малый параметр, который мог бы послужить основой разложений по «малому параметру» в соответствии разработанной динамической теории возмущений, т. е. регулярного метода исследования системы со всеми ее особенностями. И даже если такая теория возмущений могла бы быть построена, она, являясь в любом порядке приближенным методом, не смогла бы претендовать на гарантированное с математической точки зрения описание той λ -особенности теплоемкости, которая характерна для жидкого гелия-4 при температуре θ_λ исчезновения бозе-конденсата (тем более, что она

имеет экспериментально установленный Бекингом по обе стороны от λ -точки логарифмический характер $|\ln(|\theta - \theta_\lambda|/\theta_\lambda)|$, см. т. 2).

Помимо трудностей динамического характера в системах большого числа одинаковых частиц необходимо учитывать их кинематические особенности, существенно проявляющиеся в вырожденных их состояниях: для ферми-систем — это действие принципа Паули, определяющего основные особенности системы при температурах, меньших уровня Ферми ϵ_F , в бозе-системах — это влияние наличия в системе бозе-конденсата на все свойства системы в области температур ниже точки бозе-конденсации θ_0 . Эти кинематические особенности вырожденных квантовых систем неистребимы ни в каком приближении и поэтому как бы доминируют над не зависящими от температурного состояния системы динамическими особенностями взаимодействия частиц друг с другом. Они (конечно, в случае принципиальной возможности построения эффективной динамической теории возмущений) должны как бы налагаться на соответствующую кинематику системы, создавая тем самым иллюзию физической достоверности получаемых при этом конкретных результатов.

В 1946 г. Н. Н. Боголюбов в одной из лучших и известнейших работ по квантовой статистике рассмотрел неидеальную бозе-систему, в которой взаимодействие частиц друг с другом не создавало непреодолимых динамических трудностей, характерных для взаимодействия атомов реального гелия, а фурье-образ этого модельного взаимодействия $\nu(q)$ предполагался всюду конечным, чем обеспечивалась правомерность использования построенного на основе плоских волн представления вторичного квантования. Он показал, что в этой системе, в которой изначальные динамические трудности намеренно устранены, учет специфики бозевской кинематики, т. е. наличия конденсата, составляющего конечную долю общего числа частиц в системе, существенно изменяет характер самой системы, ее возбужденных состояний и т. д. В данном параграфе мы остановимся на этой основополагающей в теории неидеального бозе-газа работе, после того, как выясним причину неэффективности исследований вырожденной бозе-системы стандартными методами квантово-механической теории возмущений. Это предварительное и несложное (но несколько нудное) исследование позволит еще глубже понять целесообразность метода Боголюбова, устраняющего возникновение в этой теории трудностей кинематического происхождения.

а) Трудности формальной теории возмущений

Рассмотрим неидеальную бозе-систему при температуре $\theta = 0$ с взаимодействием частиц, потенциал которого характеризуется конечным радиусом действия R_0 и имеет фурье-образ $\nu(q)$, конечный при любых значениях q (см. рис. 25). Прежде чем выяснить, что дает квантово-механическое исследование этой системы методами стационарной теории возмущений, напомним необходимые общие формулы этой теории.

Полагая собственные функции и собственные значения оператора H_0 известными,

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle,$$

и обозначая собственные значения полного оператора Гамильтона $H = H_0 + H_1$ как $E(n) = E_n + \Delta E_n$, можно представить весь ряд разложения сдвига уровней энергии ΔE_n по степеням H_1 в виде

$$\Delta E_n = \langle n|H_1 \frac{1}{1 + \frac{P}{H_0 - E_n}(H_1 - \Delta E_n)}|n\rangle = \langle n|H_1 - H_1 \frac{P}{H_0 - E_n} H_1 + \dots|n\rangle,$$

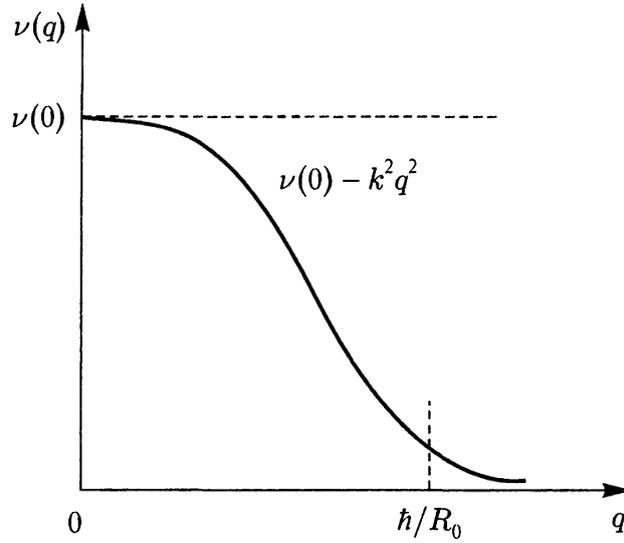


Рис. 25. Общий вид фурье-образа потенциала модельного взаимодействия частиц бозе-системы, допускающего использование представления вторичного квантования для гамильтониана системы

где

$$\frac{P}{H_0 - E_n} |m\rangle = \begin{cases} 0 & \text{в случае } m = n, \\ \frac{1}{E_m - E_n} & \text{в случае } m \neq n, \end{cases}$$

из которого, чтобы понять, в чем состоят трудности исследования неидеальной бозе-системы, нам понадобятся только три первых порядка, которые мы запишем в более привычном виде, заменяя оператор P условными штрихами у соответствующих сумм,

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= \langle n | H_1 | n \rangle; \\ \Delta E_n^{(2)} &= - \sum_k' \langle n | H_1 | k \rangle \frac{1}{E_k - E_n} \langle k | H_1 | n \rangle; \\ \Delta E_n^{(3)} &= \sum_{kl}' \langle n | H_1 | l \rangle \frac{1}{E_l - E_n} \langle l | H_1 | k \rangle \frac{1}{E_k - E_n} \langle k | H_1 | n \rangle - \\ &\quad - \langle n | H_1 | n \rangle \sum_k' \langle n | H_1 | k \rangle \frac{1}{(E_k - E_n)^2} \langle k | H_1 | n \rangle. \end{aligned}$$

Рассмотрим для начала нулевое приближение теории (хотя заранее знаем, что никакой новой информации о системе это рассмотрение не внесет). Обозначая основное состояние идеальной бозе-системы как $|N, 0\rangle = |0\rangle$ (все N частиц системы находятся в конденсате), будем считать, согласно § 3 из гл. 1, выделяя операторы с нулевым значением импульса и полагая все используемые в дальнейшем индексы p отличными от нуля, следующие правила расчета средних значений:

$$\begin{aligned} a_p |N, 0\rangle &= 0, \\ a_0 |N, 0\rangle &= \sqrt{N} |N-1, 0\rangle, \\ a_0^+ |N, 0\rangle &= \sqrt{N+1} |N+1, 0\rangle, \end{aligned} \quad \mapsto \quad \begin{aligned} \overline{a_p^+ a_p} &= \langle 0 | a_p^+ a_p | 0 \rangle = 0, \\ \overline{a_p a_p^+} &= \langle 0 | 1 + a_p^+ a_p | 0 \rangle = 1; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle 0|a_0^+ a_0|0\rangle &= N, \\ \langle 0|a_0^+ a_0^+ a_0 a_0|0\rangle &= N(N-1) \stackrel{\text{as}}{=} N^2, \\ \langle 0|a_0^+ a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 a_0|0\rangle &= N(N-1)(N-2) \stackrel{\text{as}}{=} N^3, \\ &\dots\dots\dots\end{aligned}$$

С помощью набора этих формул сразу получаем выражения для энергии основного состояния в нулевом приближении

$$E_0^{(0)} = \langle 0, N|H_0|N, 0\rangle = \langle 0|\sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^+ a_p|0\rangle = 0.$$

Сформировав нормированную функцию простейшего возбужденного состояния системы, соответствующего выходу одной частицы из конденсата,

$$|N-1, p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle 0|a_0^+ a_p a_p^+ a_0|0\rangle}} a_0 a_p^+ |N, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} a_0 a_p^+ |N, 0\rangle,$$

для энергии этого состояния системы находим выражение

$$E_p^{(0)} = \langle p, N-1|H_0|N-1, p\rangle = \frac{1}{N} \langle 0|a_0^+ a_p \sqrt{\sum_{p'} \frac{p'^2}{2m} a_{p'}^+ a_{p'}^+ a_0|0\rangle} = \frac{p^2}{2m}$$

(скобками сверху обозначена единственная не нулевая система спариваний), а для энергии возбуждения над основным состоянием системы в нулевом порядке — выражение

$$\varepsilon_p = E_p - E_0 = (E_p - E_0)^{(0)} + \dots = \frac{p^2}{2m} + \dots$$

Относясь к этим совершенно очевидным результатам как к пробе пера, перейдем к рассмотрению следующих порядков теории возмущений, используя уже явный вид оператора взаимодействия частиц друг с другом H_1 .

Ввиду выделенности операторов a_0 и a_0^+ по отношению к их действию на состояние $|0\rangle$, выделим их тоже явно в выражении для оператора H_1

$$\begin{aligned}H_1 &= \frac{1}{2V} \sum_q \sum_{\substack{pp' \\ \text{по всем} \\ \text{значениям}}} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_p a_p = \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) + \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \{ a_0^+ a_0^+ a_q a_{-q} + a_q^+ a_{-q}^+ a_0 a_0 + 2a_0^+ a_0 a_q^+ a_q \} + \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) 2 \left\{ a_0^+ a_q \sum_p a_{p+q}^+ a_p + a_0 a_q^+ \sum_p a_{p-q}^+ a_p \right\} + \frac{1}{2V} \sum_q \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_p a_p\end{aligned}$$

таким образом, что первое слагаемое в этой записи оператора H_1 , соответствующее $q=0$,

$$\frac{1}{2V} \sum_{\substack{pp' \\ \text{по всем} \\ \text{значениям}}} \nu(0) a_p^+ a_{p'}^+ a_p a_p = \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) \stackrel{\text{as}}{=} \frac{N^2}{2V} \nu(0)$$

включает комбинацию с четырьмя операторами $a_0^+ a_0^+ a_0 a_0$, второе слагаемое — с двумя «нулевыми» операторами, третье — с одним и четвертое — вообще их не содержит.

Отметим, что оператор полного числа частиц в системе

$$\hat{N} = a_0^+ a_0 + \sum_p a_p^+ a_p$$

коммутирует с операторами H_0 и H_1 . В комбинации с функцией возбужденного N -частичного состояния $|N - 1, p\rangle$ мы поэтому будем иметь

$$\hat{N}|N - 1, p\rangle = \hat{N} \frac{a_0 a_p^+}{\sqrt{N}} |0\rangle \stackrel{\text{as}}{=} N \frac{a_0 a_0^+}{\sqrt{N}} |0\rangle.$$

Учтем также, что при расчете средних значений по этому возбужденному состоянию вся совокупность полных систем спариваний «живых» операторов рождения и уничтожения, включающая внешнее спаривание $\overline{a_p \dots a_p^+}$, образует соответствующий приближению вклад в энергию основного состояния системы,

$$\frac{1}{N} \langle 0 | a_0^+ \overline{a_p \{H_1 + \dots\} a_0 a_p^+} | 0 \rangle = \frac{1}{N} \langle 0 | a_0^+ \{H_1 + \dots\} a_0 | 0 \rangle \stackrel{\text{as}}{=} \langle 0 | \{H_1 + \dots\} | 0 \rangle = E_0,$$

тогда как спаривания этих внешних операторов с «живыми» операторами, находящимися внутри фигурных скобок, образуют сдвиг ΔE_p энергии возбуждения системы над энергией основного состояния в соответствующем порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \langle 0 | a_0^+ \overline{a_p \{H_1 + \dots\} a_0 a_p^+} | 0 \rangle &= \\ &= \langle N - 1, p | \{H_1 + \dots\} | N - 1, p \rangle - \langle 0 | \{H_1 + \dots\} | 0 \rangle = \Delta E_p - E_0, \end{aligned}$$

а сама энергия возбужденного состояния с учетом нулевого приближения будет определяться выражением

$$\varepsilon_p = E_p - E_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{N} \langle 0 | a_0^+ \overline{a_p \{H_1 + \dots\} a_p^+ a_0} | 0 \rangle \stackrel{\text{as}}{=} \frac{p^2}{2m} + \langle 0 | \overline{a_p \{H_1 + \dots\} a_p^+} | 0 \rangle.$$

Замечая, что результаты расчета первого порядка теории возмущений определяются только диагональной частью оператора H_1 (т. е. первым его слагаемым, пропорциональным $\nu(0)$, и частью второго, в которую входит операторная конструкция $a_0^+ a_0 a_q^+ a_q$), получаем для сдвига (в нашем случае — от своего нулевого значения) энергии основного состояния выражение

$$\Delta E_0^{(1)} = \langle 0 | H_1 | 0 \rangle = \langle 0 | \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) | 0 \rangle \stackrel{\text{as}}{=} \frac{N^2}{2V} \nu(0),$$

для сдвига энергии возбужденного состояния системы $|N - 1, p\rangle$ — выражение

$$\begin{aligned} \Delta E_p^{(1)} &= \frac{1}{N} \langle 0 | a_0^+ a_p H_1 a_0 a_p^+ | 0 \rangle = \Delta E_0^{(1)} + \frac{1}{N} \langle 0 | a_0^+ a_p \frac{1}{V} \sum_q \overline{\nu(q) a_q^+ a_q a_0^+ a_0 a_p^+} | 0 \rangle \stackrel{\text{as}}{=} \\ &\stackrel{\text{as}}{=} \Delta E_0^{(1)} + \frac{N}{V} \nu(p) \end{aligned}$$

и для энергии возбуждения

$$\varepsilon_p^{(1)} = (E_p - E_0)^{(1)} = \frac{p^2}{2m} + \frac{N-1}{V} \nu(p) \stackrel{\text{as}}{=} \frac{p^2}{2m} + n\nu(p).$$

В расчете второго порядка теории возмущений участвуют только недиагональные члены оператора H_1 , дающие при действии на функции $|0\rangle$ и $a_0 a_p^+ |0\rangle$ ненулевой результат. Эти части оператора H_1 (и, соответственно, им сопряженные) имеют вид

$$H_1' = \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) a_0 a_0 a_q^+ a_{-q}^+ \text{ и } H_1'' = \frac{1}{V} \sum_{qp} \nu(q) a_0 a_q^+ a_{p-q}^+ a_p.$$

Вклад в ΔE_p , определяемый оператором H_1' , будет иметь вид

$$\Delta E_p^{(2)'} = -\frac{1}{4V^2} \frac{1}{N} \sum_{q_1 q_2} \langle 0 | a_0^+ a_p a_0^+ a_0^+ a_{q_1} a_{-q_1} \dots a_0 a_0 a_{q_2}^+ a_{-q_2}^+ a_p^+ a_0 | 0 \rangle \frac{\nu(q_1) \nu(q_2)}{(2E_{q_2} + E_p) - E_p},$$

где вертикальным пунктиром отмечено расположение энергетического знаменателя $1/(E_k - E_n)$. Учитывая, что все средние, в которые входит спаривание «внешних» операторов друг с другом $\overline{a_p \dots a_p^+}$, вносят вклад в энергию основного состояния $\Delta E_0^{(2)'}$ (которую мы рассчитаем отдельно несколько позже), а спаривания этих операторов с внутренними операторами a_{q_1} и $a_{q_2}^+$ образуют $2 \times 2 = 4$ эквивалентные друг другу возможности, получаем

$$\Delta E_p^{(2)'} = \Delta E_0^{(2)} - \frac{1}{4V^2} \frac{1}{N} \frac{\nu^2(p)}{2E_p} 4N(N-1)(N-2) \stackrel{\text{as}}{=} \Delta E_0^{(2)} - n^2 \frac{\nu^2(p)}{2E_p}.$$

Оператор H_1'' вклада в коррекцию основного состояния $\Delta E_0^{(2)}$ не дает, а для сдвига энергии ΔE_p получаем

$$\Delta E_p^{(2)''} = -\frac{1}{4V^2} \frac{4}{N} \sum_{q_1 q_2 p_1 p_2} \langle 0 | a_0^+ \overbrace{a_p a_0^+ a_{q_1} a_{p_1+q_1} a_{p_1}}^{\dots} \dots a_0 a_{q_2}^+ a_{p_2-q_2} a_{p_2} a_0 a_p^+ | 0 \rangle \frac{\nu(q_1) \nu(q_2)}{E_{p_2-q_2} + E_{q_2} - E_{p_2}}$$

(мы обозначили здесь две возможные ненулевые системы полных спариваний «живых» операторов рождения и уничтожения, в обе из которых необходимым элементом входят одинаковые спаривания внешних операторов a_p и a_p^+ с операторами из H_1''). Снимая три суммирования (из четырех), получаем

$$\Delta E_p^{(2)''} = -\frac{N(N-1)}{NV^2} \sum_q \frac{\nu^2(q) + \nu(q)\nu(p-q)}{E_{p-q} + E_q - E_p} \stackrel{\text{as}}{=} -\frac{n}{(2\pi\hbar)^3} \int dq \frac{\nu(q)(\nu(q) + \nu(p+q))}{E_{p+q} + E_q - E_p}.$$

Сравнивая полученные вклады $\Delta E_p^{(2)'}$ и $\Delta E_p^{(2)''}$, образованные операторами H_1' и H_1'' , обнаруживаем существенное их различие в области малых значений импульса p : в то время как определяемая оператором H_1'' часть

$$\Delta E_p^{(2)''} \Big|_{p \rightarrow 0} \rightarrow -\frac{n}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \frac{4\pi q^2 dq \cdot 2\nu^2(q)}{2E_q} = -\frac{n}{(2\pi\hbar)^3} 8\pi m \int_0^\infty \nu^2(q) dq = \text{const}$$

стремится к конечной величине, сдвиг $\Delta E_p^{(2)'}$, обусловленный оператором H_1' , в области малых значений p расходится,

$$\Delta E_p^{(2)'} - \Delta E_0^{(2)} = -n^2 \frac{\nu^2(p)}{2E_p} = -n^2 m \frac{\nu^2(p)}{p^2}.$$

Поэтому, приступая с этого момента к подготовке предстоящей аппроксимационной процедуры, мы сохраняем в разложении энергии возбуждения системы главную последовательность, генерируемую операторами, входящими во второе слагаемое общего представления гамильтониана взаимодействия частиц системы H_1 ,

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m} + n\nu(p) - n^2 \frac{\nu^2(p)}{2E_p} + \dots$$

Сдвиг энергии основного состояния во втором порядке рассчитывается достаточно просто:

$$\begin{aligned} \Delta E_0^{(2)} &= -\frac{1}{4V^2} \sum_{q_1 q_2} \langle 0 | a_0^+ a_0^+ \overbrace{a_{q_1} a_{-q_1} \dots a_0 a_0 a_{q_2}^+ a_{-q_2}^+} | 0 \rangle \frac{\nu(q_1)\nu(q_2)}{2E_{q_2}} \stackrel{\text{as}}{=} \\ &\stackrel{\text{as}}{=} -\frac{n^2}{2} \sum_q \frac{\nu^2(q)}{2E_q} = -N \frac{2\pi n m}{(2\pi \hbar)^3} \int_0^\infty \nu^2(q) dq. \end{aligned}$$

Более высокие члены разложения по степеням интенсивности взаимодействия бозе-частиц, входящей в функцию $\nu(q)$, уже не имеют смысла рассматривать: в формальный третий порядок для сдвига энергии основного состояния системы $\Delta E_0^{(3)}$ входит сумма, отличающаяся от только что рассчитанной квадратом энергетического знаменателя, что сразу делает весь результат для $\Delta E^{(3)}$ ввиду ее расходимости математически бессмысленным,

$$\sum_k' \langle n | H_1 | k \rangle \langle k | H_1 | n \rangle \frac{1}{(E_n - E_k)^2} \sim \sum_q \frac{\nu^2(q)}{(2E_q)^2} \sim \int_0^\infty \frac{\nu^2(q)q^2 dq}{q^4} = \int_0^\infty \frac{\nu^2(q) dq}{q^2} = \infty,$$

так что разумные результаты разложения по целым степеням ν завершаются вторым порядком.

Чтобы не возникало впечатления, что обнаруженная практически без усилий указанная расходимость обязана только несвязанной части в $\Delta E_0^{(3)}$, вклад от которой, как не имеющий правильного статистического порядка по N должен, согласно замечанию ж) в § 2, п. б) первой главы, аннигилировать с вкладом от соответствующей системы спариваний из первого слагаемого $\Delta E_0^{(3)}$, укажем на точно такую же расходимость, возникающую в результате учета связанной системы спариваний в третьем порядке по $\nu(q)$. Имеем,

$$\begin{aligned} \Delta E_0^{(3)'} &= \frac{1}{8V^3} \sum_{q_1 q_2 q_3} \langle 0 | a_0^+ a_0^+ \overbrace{a_{q_1} a_{-q_1} \dots 2a_0^+ a_0 a_{q_2}^+ a_{q_2} \dots a_{q_3}^+ a_{-q_3}^+ a_0 a_0} | 0 \rangle \frac{\nu(q_1)\nu(q_2)\nu(q_3)}{2E_{q_3} \cdot 2E_{q_3}} \stackrel{\text{as}}{=} \\ &\stackrel{\text{as}}{=} \frac{4N^3}{8V^3} \sum_q \frac{\nu^3(q)}{2E_q^2} = N \frac{m^2 n^2}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \nu^3(q) \frac{dq}{q^2} = \infty. \end{aligned}$$

Подведем итоги исследований системы методом традиционной теории возмущений. Во-первых, расходимость формального третьего порядка по константе взаимодействия, которую мы условно будем обозначать той же буквой ν , что и $\nu(q)$, вовсе не означает кризиса жанра: это положительный результат, свидетельствующий о том,

что зависимость энергии основного состояния вырожденной бозе-системы от интенсивности взаимодействия ее частиц ν не является аналитической, полученные первые члены разложения $E_0(\nu) = a\nu + b\nu^2 + \dots$ являются членами асимптотического ряда, а расходимость коэффициента при третьей степени $E_0(\nu)^{(3)} = c\nu^3 \rightarrow \infty$ точно фиксирует появление в функции $E_0(\nu)$ зависимости, не укладывающейся в целочисленное разложение по степеням ν и имеющей при $\nu \rightarrow 0$ более слабую зависимость, чем ν^2 , но более сильную, чем ν^3 (мы покажем в дальнейшем, что эта промежуточная зависимость от ν имеет характер $\nu^{5/2}$). Эту неаналитическую зависимость в принципе можно получить и с помощью теории возмущений, отсуммировав бесконечную последовательность соответственно отобранных членов формального ее ряда. В последующем исследовании мы достигнем этих результатов более экономным способом.

Во-вторых, теория возмущений дала результат для энергии возбуждения системы $\varepsilon_p = (E_p - E_0)$ в виде разложения по степеням ν , имеющего формальный смысл только при условии

$$E_p = \frac{p^2}{2m} \gg n\nu(p),$$

т. е. поправки к результату нулевого приближения, которым является идеальный бозе-газ, относятся к сравнительно большим значениям импульса p , в то время как наибольший теоретический интерес представляют низколежащие возбужденные состояния (хотя бы потому, что именно они определяют все низкотемпературные свойства системы), модификацию которых полученная с помощью теории возмущений формула для ε_p вообще не описывает.

Осознав все эти трудности исследования вырожденной неидеальной бозе-системы и ограниченность возможностей теории возмущений, нам будет легче понять предложенный Н. Н. Боголюбовым метод их преодоления.

б) Приближенное вторичное квантование. Модельный гамильтониан

Проведенное в пункте а) предварительное рассмотрение проблемы неидеального вырожденного бозе-газа обнаруживает два характерных обстоятельства, учет которых существенно влияет на развитие идеологии дальнейших исследований этой проблемы.

Во-первых, существенная выделенность бозе-операторов a_0 и a_0^+ , определившая особенности не только самого исходного идеального газа, но и результаты, полученные с помощью теории возмущений в его неидеальном варианте, дает основание предположить, что включение взаимодействия $\nu(q)$ (самого благополучного в аналитическом плане и произвольно слабого) не разрушает существовавшего до этого в системе бозе-конденсата, и число частиц в нем N_0 остается макроскопическим, т. е.

$$a_0^+ a_0 = a_0 a_0^+ + 1 = N_0, \quad \text{где } N_0 \sim N \gg 1.$$

Это означает, что в асимптотическом пределе $N \rightarrow \infty$, $N/V = n = \text{const}$ учет некоммутативности операторов a_0 и a_0^+ в статистической теории, подчиненной предельной статистической процедуре, относится к негарантированным этой теорией поправкам,

$$\frac{a_0 a_0^+ - a_0^+ a_0}{N_0} = \frac{1}{N_0} \sim \frac{1}{N} \rightarrow 0,$$

в связи с чем у нас появляются основания полагать, что операторные величины $a_0/\sqrt{N_0}$ и $a_0^+/\sqrt{N_0}$ в этой послепредельной статистической теории равновесных со-

стояний ведут себя как обычные c -числа. Это не просто «наводящее» соображение, а скорее руководящее указание к дальнейшим действиям.

Во-вторых, проведенный в пункте а) анализ позволяет сделать вывод, что самые ответственные за появление первых специфических для вырожденного бозе-газа результатов в разложении по степеням ν члены гамильтониана H включают (помимо H_0 и неизменно присутствующей поправки первого порядка $N\nu(0)/2$) все квадратичные по нулевым операторам его части:

$$H' = \frac{N(N-1)}{2V}\nu(0) + \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^+ a_p + \\ + \frac{1}{2V} \sum_p \nu(p) \{ a_0^+ a_0^+ a_p a_{-p} + a_0 a_0 a_p^+ a_{-p}^+ + 2a_0^+ a_0 a_p^+ a_p \}.$$

Опущенные члены гамильтониана при их включении в исследование конечно же приведут к появлению дополнительных характерных расходимостей и т. п., но уже в более высоких порядках по ν , чем обнаруженные в пункте а) (см. § 3, рис. 36), поэтому в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением уже только модельного варианта неидеальной бозе-системы, характеризующейся гамильтонианом H' .

Введем новые операторы

$$b_p = \frac{a_0^+ a_p}{\sqrt{N_0}}; \quad b_p^+ = \frac{a_0 a_p^+}{\sqrt{N_0}},$$

имеющие, в свете исследований пункта а), вполне понятный физический смысл, и выразим через них оператор H' исследуемой системы. Имеем:

$$a_0^+ a_0 a_p^+ a_p = N_0 b_p^+ b_p, \quad a_0^+ a_0^+ a_p a_{-p} = N_0 b_p b_{-p}, \quad a_0 a_0 a_p^+ a_{-p}^+ = N_0 b_p^+ b_{-p}^+$$

и, наконец,

$$b_p^+ b_p = \frac{a_0 a_0^+}{N_0} a_p^+ a_p = \left(1 + \frac{a_0 a_0^+ - N_0}{N_0} \right) a_p^+ a_p \cong a_p^+ a_p.$$

При написании последнего соотношения мы учли, что оператор $(a_0 a_0^+ - N_0)/N_0$ существует не сам по себе, а в сочетании с другими операторами, включая и операторы a_0 и a_0^+ , от всей совокупности которых затем берется в конце концов среднее значение. Поэтому комбинация $a_0 a_0^+$ приведет к появлению если не точно числа N_0 , то $N_0 \pm 1$ или $N_0 \pm 2$ и т. д., что в совокупности со вторым слагаемым $-N_0$ приведет к появлению в статистическом предельном случае исчезающе малого множителя $\sim 1/N_0 \sim 1/N \rightarrow 0$. В связи со сделанным примечанием новые операторы в том же асимптотическом смысле оказываются практически бозевскими,

$$b_p b_{p'}^+ - b_{p'}^+ b_p = \frac{a_0^+ a_0 a_p a_{p'}^+ - a_0 a_0^+ a_{p'}^+ a_p}{N_0} = \\ = \frac{a_0^+ a_0}{N_0} [a_p, a_{p'}^+]_- + \frac{1}{N_0} a_{p'}^+ a_p \stackrel{\text{as}}{=} [a_p, a_{p'}^+]_- = \Delta(p - p').$$

Это пренебрежение асимптотической небозевостью новых операторов b_p и b_p^+ было названо Боголюбовым процедурой приближенного вторичного квантования, которая в данном исследовании сводится в конечном итоге к простому рецепту — замене в гамильтониане H' операторов a_0 и a_0^+ на числа, $a_0 \rightarrow \sqrt{N_0}$, $a_0^+ \rightarrow \sqrt{N_0}$.

Перенеся постоянное слагаемое, пропорциональное $\nu(0)$, в левую часть равенства (осуществив тем самым примитивную перенормировку энергии системы) и поменяв обозначение новых почти бозевских операторов b_p и b_p^+ на привычные a_p и a_p^+ , получаем исходную квадратичную по этим операторам форму модельного гамильтониана

$$H_{\text{мод}} = H' - \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) = \sum_p \left\{ (E_p + n_0 \nu(p)) a_p^+ a_p + \frac{1}{2} n_0 \nu(p) (a_p a_{-p} + a_{-p}^+ a_p^+) \right\},$$

где $E_p = p^2/(2m)$, а $n_0 = N_0/V$ — объемная плотность числа частиц в конденсате, определяемая условием N -частичности рассматриваемой системы,

$$n_0 = n - \frac{1}{V} \sum_p \langle a_p^+ a_p \rangle.$$

Сделаем несколько подытоживающих этот пункт замечаний.

Во-первых, приняв ряд физически оговоренных ограничений (существование макроскопического бозе-конденсата $N_0 \sim N$ и модельность взаимодействия $\nu(q)$, исключающего появление динамических трудностей), мы свели проблему исследования вырожденной неидеальной бозе-системы к точно решаемой в смысле § 1 этой главы задаче.

Во-вторых, если бы мы стали на основе $H_{\text{мод}}$ развивать по аналогии с пунктом а) теорию возмущений, то получили бы главную последовательность результатов со всеми характерными начальными расходимостями с той только разницей, что вместо плотности числа частиц $n = N/V$ всюду стояла бы плотность числа конденсатных частиц $n_0 = N_0/V$. Так как мы в дальнейшем покажем, что $n_0 = n - \alpha \nu^{3/2}$, то совпадение этих разложений в низших порядках по ν окажется полным.

В-третьих, напомним еще раз, что появление специфических расходимостей, обнаруженных в исследованиях пункта а), связано целиком с бозевской «кинематикой» вырожденной системы (т. е. с макроскопическим бозе-конденсатом), а не с динамическими особенностями взаимодействия $\nu(q)$. В ферми-случае, когда выделенных по импульсу состояний частиц нет, и теорема о спариваниях работает по отношению ко всем без исключения операторам рождения и уничтожения, эти расходимости не возникают.

И наконец, результат суммирования всей генерируемой модельным гамильтонианом главной последовательности членов ряда теории возмущений, все более формально расходящихся, начиная с третьего порядка, полностью соответствует точному решению статистической задачи для этой системы, к получению которого мы и переходим в следующем пункте.

в) Точное решение статистической задачи для модельной бозе-системы

Так как мы отдаем предпочтение двухвременному формализму, используем метод двухвременных функций Грина для рассмотрения бозе-системы, характеризуемой гамильтонианом

$$H_{\text{мод}} = H' - \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) = \sum_{p'} \left\{ (E_{p'} + n_0 \nu(p')) a_{p'}^+ a_{p'} + \frac{1}{2} n_0 \nu(p') (a_{p'} a_{-p'} + a_{-p'}^+ a_{p'}^+) \right\},$$

где $E_{p'} = p'^2/(2m)$ и $\nu(p')$ — четные функции своих аргументов, а $n_0 = N_0/V$ — пока неизвестный параметр, который будет впоследствии определен с помощью

условия N -частичности системы. Выбрав из суммы по p' слагаемые с $p' = p$ и рассчитав необходимые в дальнейшем коммутаторы операторов a_p и a_{-p}^+ с модельным гамильтонианом,

$$\begin{aligned} [a_p, H_{\text{мод}}]_- &= \left[a_p, (E_p + n_0\nu(p))a_p^+ a_p + \frac{1}{2}n_0\nu(p)(a_{-p}^+ a_p^+ + a_p^+ a_{-p}^+) \right]_- = \\ &= (E_p + n_0\nu(p))a_p + n_0\nu(p)a_{-p}^+, \\ [a_{-p}^+, H_{\text{мод}}]_- &= -[a_{-p}, H_{\text{мод}}]_-^+ = -(E_p + n_0\nu(p))a_{-p}^+ - n_0\nu(p)a_p, \end{aligned}$$

убеждаемся в том, что система уравнений (1) и (2) (см. § 1, п. б)) для функций Грина $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ и $\langle\langle a_{-p}^+ | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= 1 + \langle\langle [a_p, H_{\text{мод}}]_- | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}, \\ \mathcal{E} \langle\langle a_{-p}^+ | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= \langle\langle [a_{-p}^+, H_{\text{мод}}]_- | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} \end{aligned}$$

(мы выбрали здесь, естественно, параметр $\eta = 1$), оказывается замкнутой:

$$\begin{cases} (\mathcal{E} - (E_p + n_0\nu(p))) \langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} - n_0\nu(p) \langle\langle a_{-p}^+ | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = 1, \\ n_0\nu(p) \langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} + (\mathcal{E} + (E_p + n_0\nu(p))) \langle\langle a_{-p}^+ | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = 0. \end{cases}$$

Обозначая

$$E(p) = \sqrt{E_p(E_p + 2n_0\nu(p))}, \quad E_p = \frac{p^2}{2m},$$

получаем для детерминанта этой неоднородной системы двух линейных алгебраических уравнений выражение:

$$\Delta(\mathcal{E}) = \mathcal{E}^2 - (E_p + n_0\nu(p))^2 + (n_0\nu(p))^2 = \mathcal{E}^2 - (E_p^2 + 2n_0\nu(p)E_p) = \mathcal{E}^2 - E^2(p),$$

что позволяет записать решения этих уравнений в достаточно простом виде

$$\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \frac{\mathcal{E} + (E_p + n_0\nu(p))}{\mathcal{E}^2 - E^2(p)}, \quad \langle\langle a_{-p}^+ | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \frac{-n_0\nu(p)}{\mathcal{E}^2 - E^2(p)}.$$

Представим эти результаты в виде суммы слагаемых с простыми полюсами в точках $\mathcal{E} \pm E(p)$ на действительной оси энергии (точно решаемые системы затуханием не обладают),

$$\begin{aligned} \langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= \left(\frac{1}{2} + \frac{E_p + n_0\nu(p)}{2E(p)} \right) \frac{1}{\mathcal{E} - E(p)} + \left(\frac{1}{2} - \frac{E_p + n_0\nu(p)}{2E(p)} \right) \frac{1}{\mathcal{E} + E(p)}, \\ \langle\langle a_{-p}^+ | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= -\frac{n_0\nu(p)}{2E(p)} \frac{1}{\mathcal{E} - E(p)} + \frac{n_0\nu(p)}{2E(p)} \frac{1}{\mathcal{E} + E(p)}, \end{aligned}$$

и переведем их на язык соответствующих спектральных плотностей, учитывая, что

$$J(B, A; E) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{e^{E/\theta} - 1} \text{Im} \langle\langle A | B \rangle\rangle_{E+i\varepsilon}$$

и что

$$-\frac{1}{\pi} \frac{1}{e^{E/\theta} - 1} \text{Im} \frac{1}{E \pm E(p) + i\varepsilon} = \frac{1}{e^{\pm E(p)/\theta} - 1} \delta(E \mp E(p)).$$

Тогда получим, исключая неестественную с точки зрения привычного бозе-распределения конструкцию с помощью соотношения

$$\frac{1}{e^{-E(p)/\theta} - 1} = - \left(1 + \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} \right),$$

для этих спектральных плотностей

$$\begin{aligned} J(a_p^+, a_p; E) &= \frac{E(p) + E_p + n_0\nu(p)}{2E(p)} \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} \delta(E - E(p)) - \\ &\quad - \frac{E(p) - E_p - n_0\nu(p)}{2E(p)} \left(1 + \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} \right) \delta(E + E(p)), \\ J(a_p^+, a_{-p}^+; E) &= - \frac{n_0\nu(p)}{2E(p)} \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} \delta(E - E(p)) - \\ &\quad - \frac{n_0\nu(p)}{2E(p)} \left(1 + \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} \right) \delta(E + E(p)). \end{aligned}$$

Чтобы получить выражение для внутренней энергии системы $\mathcal{E} = \langle H' \rangle$, учтем, что, так как

$$\langle BA \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J(B, A; E) dE,$$

для получения средних значений $\langle a_p^+ a_p \rangle$ и $\langle a_{-p}^+ a_p^+ \rangle = \langle a_p a_{-p} \rangle$ достаточно просто убрать δ -функции в выражениях для $J(a_p^+, a_p; E)$ и $J(a_p^+, a_{-p}^+; E)$. Тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \langle H' \rangle &= \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) + \\ &+ \sum_p \left\{ (E_p + n_0\nu(p)) \frac{E(p) + E_p + n_0\nu(p)}{2E(p)} - 2 \frac{n_0\nu(p)}{2} \cdot \frac{n_0\nu(p)}{2E(p)} \right\} \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} - \\ &- \sum_p \left\{ (E_p + n_0\nu(p)) \frac{E(p) - (E_p + n_0\nu(p))}{2E(p)} + 2 \frac{n_0\nu(p)}{2} \cdot \frac{n_0\nu(p)}{2E(p)} \right\} \left(1 + \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} \right). \end{aligned}$$

Собрав слагаемые, не обращающиеся в нуль при $\theta \rightarrow 0$, получаем

$$\frac{1}{2E(p)} \left\{ (E_p + n_0\nu(p))^2 - E(p)(E_p + n_0\nu(p)) - (n_0\nu(p))^2 \right\} = \frac{1}{2} (E(p) - E_p - n_0\nu(p)),$$

а сумма коэффициентов при новом бозе-распределении $(e^{E(p)/\theta} - 1)^{-1}$ благополучно собирается в боголюбовский корень $E(p)$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2E(p)} \left\{ (E_p + n_0\nu(p))^2 + E(p)(E_p + n_0\nu(p)) - (n_0\nu(p))^2 + (E_p + n_0\nu(p))^2 - \right. \\ \left. - E(p)(E_p + n_0\nu(p)) - (n_0\nu(p))^2 \right\} = E(p), \end{aligned}$$

и мы получаем окончательно достаточно красноречивый результат:

$$\mathcal{E} = \langle H' \rangle = \mathcal{E}_0 + \sum_p E(p) \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1},$$

где энергия основного состояния системы

$$\mathcal{E}_0 = \mathcal{E}'|_{\theta \rightarrow 0} = \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) + \frac{1}{2} \sum_p (E(p) - E_p - n_0 \nu(p)),$$

а второе слагаемое в выражении для \mathcal{E}' представляет собой внутреннюю энергию идеального бозе-газа из «квазичастиц» (т. е. возбужденных состояний системы), энергия которых имеет характерную зависимость от импульса, определяемую боголюбовским спектром возбужденных состояний $E(p)$.

Прежде чем перейти к подробному обсуждению достигнутых выше результатов исследования неидеальной бозе-системы, заметим, что они были получены Н. Н. Боголюбовым в 1946 г. не с помощью техники двухвременных статистических функций Грина (которой тогда еще не существовало), а на квантово-механическом уровне методом диагонализации предложенного им модельного гамильтониана H' (эта работа была доложена на Общем собрании Отделения физико-математических наук АН СССР в октябре 1946 г., тогда же послана в печать в Journ. of Phys. (USSR) и Изв. АН СССР и вышла в свет в 1947 г.). Вряд ли стоит повторять всю громоздкую методику приведения общей квадратичной формы к диагональному виду, изложенную в § 1, п. а) этой главы, так как в данном случае обрабатываемый гамильтониан включает однократную сумму по импульсу p , каждое слагаемое которой диагонализуется как бы автономно, и эта процедура не выглядит столь грандиозной. Записывая $(u-v)$ -преобразование Боголюбова в виде, «перепутывающем» состояния с противоположными импульсами,

$$a_p = u_p \xi_p + v_p \xi_{-p}^+, \quad a_p^+ = u_p \xi_p^+ + v_p \xi_{-p},$$

где в данном случае действительные коэффициенты этого канонического преобразования удовлетворяют условию

$$u_p^2 - v_p^2 = 1,$$

обеспечивающему бозевость новых операторов, $[\xi_p, \xi_{p'}^+]_- = \Delta(p-p')$, $[\xi_p, \xi_{p'}]_- = 0$, замечаем, что это преобразование является по существу однопараметрическим. Если представить эти коэффициенты в виде $u_p = \text{ch } \alpha_p$ и $v_p = \text{sh } \alpha_p$, то само $(u-v)$ -преобразование приобретает смысл поворота в гиперпространстве на «угол» α_p базиса, на котором строится представление вторичного квантования по отношению к исходному, построенному на основе стандартных плоских волн $\varphi_p(\mathbf{r})$ (см. гл. 1, § 3).

Если преобразовать модельный гамильтониан к ξ -операторам и потребовать, чтобы коэффициенты при недиагональных комбинациях новых операторов обращались бы в нуль, то, выполнив аккуратно все полагающиеся алгебраические действия и воспользовавшись уже принятыми ранее обозначениями, получим для этих коэффициентов следующие выражения:

$$u_p = \frac{n_0 \nu(p)}{\sqrt{(n_0 \nu(p))^2 - (E(p) - E_p - n_0 \nu(p))^2}},$$

$$v_p = \frac{E(p) - E_p - n_0 \nu(p)}{\sqrt{(n_0 \nu(p))^2 - (E(p) - E_p - n_0 \nu(p))^2}}.$$

При этом (и это самое главное) преобразованный гамильтониан H' принимает вид гамильтониана идеальной бозе-системы с боголюбовским спектром возмущений $E(p) = \sqrt{E_p(E_p + 2n_0 \nu(p))}$ и сдвинутой на величину \mathcal{E}_0 энергией основного

состояния,

$$H' = \mathcal{E}_0 + \sum_p E(p) \xi_p^+ \xi_p,$$

что в точности соответствует результатам, полученным в статистическом варианте с помощью метода двухвременных температурных функций Грина.

г) Обсуждение полученных результатов

1. Особенности спектра возбужденных состояний

Результат, полученный Боголюбовым для зависимости энергии возбужденных состояний бозе-системы от импульса, является основным выводом этой теории. Было показано, что в вырожденной бозе-системе, когда конечная доля всех частиц системы образует бозе-конденсат, при наличии даже «слабого» (в смысле — не создающего динамических трудностей) и поэтому модельного взаимодействия частиц друг с другом структура возбужденных состояний существенно отличается от одночастичных возбуждений, связанных с выходом отдельных частиц из конденсатного состояния, и представляется дисперсионной зависимостью энергии возбуждений от импульса

$$E(p) = \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2n_0\nu(p) \right)},$$

которая в низколежащей области принципиально не укладывается в «поправочную» конструкцию к результату для идеального газа. Рассмотрим эту характерную зависимость и некоторые связанные с ней вопросы подробнее.

В области больших значений импульса $p^2/(2m) = E_p \gg n_0\nu(p)$ формула для $E(p)$ приводит к разложению

$$E(p) \cong E_p + n_0\nu(p) - n_0^2 \frac{\nu^2(p)}{2E_p} + \dots,$$

знакомому нам по пункту а) этого параграфа, и при учете того, что, как мы покажем в следующем пункте данного обсуждения, $n_0 = n - \alpha\nu^{3/2}$, полностью совпадающему, как это и должно было случиться (см. п. б) этого параграфа), с результатом исследования этого вопроса с помощью теории возмущений.

В области малых импульсов, $p^2/(2m) \ll n_0\nu(p)$ (которая теорией возмущений не охватывалась), мы получаем совершенно иной результат,

$$E(p) \cong \sqrt{\frac{p^2}{2m} \cdot 2n_0\nu(p)} = p \sqrt{\frac{n_0\nu(p)}{m}} \cong p \sqrt{\frac{n_0\nu(0)}{m}} = pc,$$

а именно, линейный по импульсу спектр, характерный для фононов. Эта низколежащая область энергий возбужденных состояний в низкотемпературной области $\theta \ll p^*c$, где $p^{*2}/(2m) < n_0\nu(0)$, существенно влияет на термодинамические свойства системы, в частности у системы обнаруживается кубическая зависимость теплоемкости от температуры $C \sim \theta^3$ (вместо характерной для идеального газа зависимости $C \sim \theta^{3/2}$, см. т. 2, гл. 2, § 2, п. г)), что вполне соответствует низкотемпературному участку зависимости теплоемкости реального жидкого гелия от температуры (см. рис. 26).

Привлекая для интерпретации характера этих низколежащих возбужденных состояний соображения феноменологической теории сплошной среды, убедимся, что полученное выше выражение для величины скорости распространения фонона c совпадает в низшем порядке по ν с гидродинамической скоростью распространения продольного возмущения плотности. Действительно, в области низких температур $\theta \cong 0$, когда, согласно III началу термодинамики, свободная энергия совпадает с внутренней, а адиабата с изотермой, имеем для давления в системе

$$P = \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial V} \right)_{\theta} \cong \left(-\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial V} \right)_{\theta} \cong \cong -\frac{\partial}{\partial V} \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) = \frac{n^2 \nu(0)}{2},$$

откуда для квадрата гидродинамической скорости звука получаем выражение

$$c_{\text{гд}}^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{\partial P}{m \partial n} \cong \frac{n \nu(0)}{m} = \frac{n_0 + \alpha \nu^{3/2}}{m} \nu(0) \cong \frac{n_0 \nu(0)}{m} = c^2,$$

совпадающее в низшем порядке по ν с выражением, определяющим фононную часть боголюбовского спектра $E(p)$, подтверждая тем самым явно коллективный характер низколежащих возбужденных состояний вырожденной бозе-системы.

Интересно сравнить результаты гидродинамического подхода к пониманию физической природы колебательного процесса в системе из нейтральных частиц с теми процессами, которые мы рассматривали в гл. 3, § 6. Исходная система гидродинамических уравнений, включающая уравнение непрерывности и уравнение Эйлера

$$\dot{\rho} + \text{div } \rho \mathbf{u} = 0, \quad \rho \dot{\mathbf{u}} + \text{grad } P = \mathbf{F},$$

различается для этих систем только тем, что для системы из нейтральных частиц $\mathbf{F} = 0$, а в системе с кулоновским взаимодействием частиц

$$\mathbf{F} = \rho_0 \frac{e}{m} \mathbf{E}_1; \quad \text{div } \mathbf{E}_1 = 4\pi \rho_1 \frac{e}{m}.$$

В линеаризованном варианте $\rho = \rho_0 + \rho_1$, $\rho_0 = mn$, учитывая, что

$$\text{grad } P = \frac{\partial P}{\partial \rho} \text{grad } \rho_1 = c_{\text{гд}}^2 \text{grad } \rho_1,$$

сразу получаем, исключая \mathbf{E}_1 , уравнение для малых продольных колебаний плотности

$$\ddot{\rho}_1 - c_{\text{гд}}^2 \nabla^2 \rho_1 + \omega_0^2 \rho_1 = 0.$$

Его решение в виде распространяющейся волны $\rho_1 \sim e^{-i\omega t + ikx}$ определяет зависимость частоты этих продольных колебаний плотности от волнового числа

$$\omega^2 = \omega_0^2 + c_{\text{гд}}^2 k^2.$$

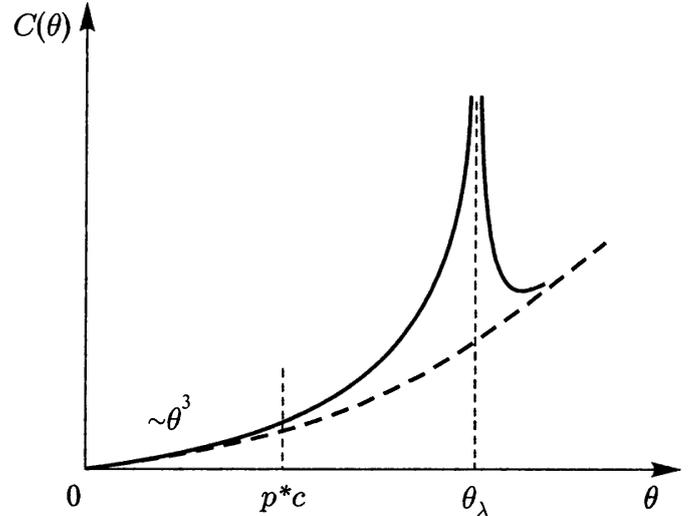


Рис. 26. График температурной зависимости теплоемкости жидкого гелия-4 с характерной кубической зависимостью начального его участка, обусловленной фононной природой низколежащих возбужденных состояний системы

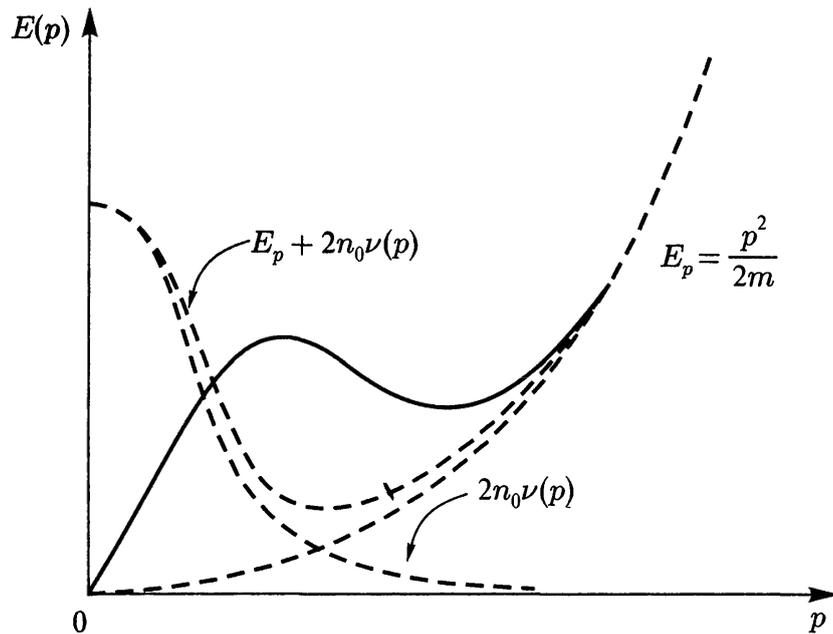


Рис. 27. Общий вид зависимости энергии возбужденных состояний бозе-системы

$$E(p) = \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2n_0\nu(p) \right)}$$

и графики элементов подкоренного выражения (пунктир)

Для системы нейтральных частиц $\omega_0^2 = 0$, и спектр частот оказывается фононным, а в случае плазмы основным результатом оказывается $\omega \cong \omega_0$, причем сама форма зависимости энергии плазменных колебаний от взаимодействия $\nu(p)$

$$\hbar\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar^2 n}{m}} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 \hbar^2}{p^2} \cdot \frac{p^2}{2m} \cdot 2n} = p \sqrt{\frac{n\nu(p)}{m}}$$

совпадает с полученным выше значением $E(p)$ в области $p \ll \sqrt{2mn\nu(p)}$ (особенность кулоновского потенциала взаимодействия при малых значениях импульса $\nu(p) \sim 1/p^2$ как бы поднимает характерную для продольных колебаний плотности фононную зависимость pc до уровня плазменной частоты $\hbar\omega_0$).

Общий вид зависимости энергии $E(p)$ от импульса представлен на рис. 27. Он имеет фононный участок при $p < \sqrt{4mn_0\nu(p)}$ и характерный провал перед выходом в область больших значений импульса, когда $E(p) \rightarrow p^2/(2m)$.

Остановимся кратко на истории развития представлений о структуре возбужденных состояний вырожденной бозе-системы.

В своей фундаментальной работе 1941 г. Л. Д. Ландау на основе достаточно общих физических соображений предположил, что помимо фононной ветви возбужденных состояний $E_{\text{фон}} = pc$, обеспечивающей начальную кубическую зависимость теплоемкости от температуры, в жидком гелии-4 существует еще один тип возбуждений, аналогичный борновской ветви возбуждений в твердом теле (см. т. 2, гл. 2, § 4), когда крутильные колебания многоатомного узла решетки передаются соседним узлам и образуется бегущая волна полуворачивающихся узлов. Так как эти «крутильные» возбуждения в отличие от фононов несут определенный угловой момент, они были названы ротонами. Их спектр, как и борновский, отделен от основного состояния энергетической щелью Δ , а вид дисперсионной зависимости от импульса определяется квадратичной зависимостью от p с некоторым параметром типа эффективной

массы m^* ,

$$E_{\text{рот}}(p) = \Delta + \frac{p^2}{2m^*}.$$

Таким образом (помимо скорости c распространения волны плотности), в теорию были введены два подгоночных параметра Δ и m^* (см. рис. 27).

После того как работа Боголюбова стала известной, Ландау (первоначально воспринявший ее весьма негативно) быстро изменил предложенную им ранее схему возбужденных состояний гелия (краткая заметка по этому поводу поступила в тот же Journ. of Phys. (USSR) на месяц позже боголюбовской статьи, а также в Письма в ЖЭТФ), сдвинув дно ротонной параболы на величину p_0 (см. рис. 28),

$$E'_{\text{рот}}(p) = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*},$$

и объединил обе ветви $E_{\text{фон}}(p)$ и $E'_{\text{рот}}(p)$ в одну, образовав боголюбовоподобную кривую $E(p)$. При этом, во-первых, в этой теории появилось три подгоночных параметра, Δ , m^* и p_0 (как тут не вспомнить язвительное замечание Ландау, неоднократно звучавшее на его семинарах по поводу докладываемых на них работ, что с помощью трех подгоночных параметров можно аппроксимировать любую экспериментально полученную зависимость), и, во-вторых, пойдя на объединение обеих ветвей в одну ветвь возбужденных состояний, в которой, начиная с фононов, ничего не крутится и с увеличением импульса закрутиться уже не может, Ландау, сохранив уже прижившийся с 1941 г. термин «ротон» (ротонная яма и т. п.), лишил его первоначального логического смысла.

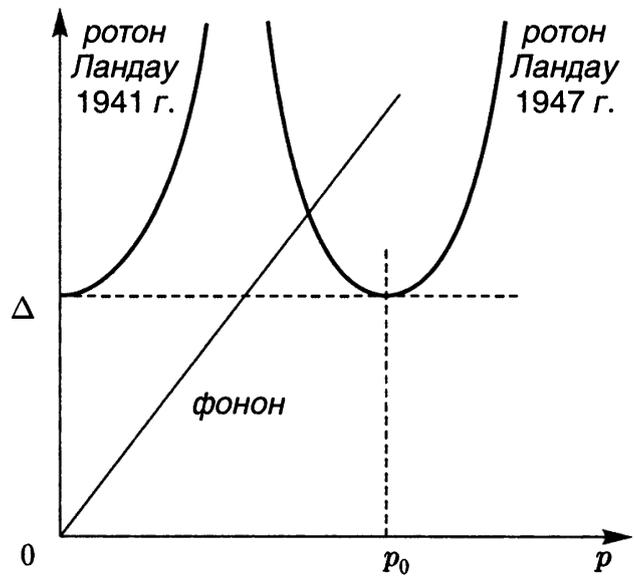


Рис. 28. Схема возбужденных состояний в жидком гелии-4, предложенная Ландау в 1941 и 1947 гг.

При очередном переиздании своего учебника по статистической физике Ландау включил в него изложение теории Боголюбова (этот вариант его книги сначала появился за рубежом на английском языке), и, желая усилить ее динамическую сторону, приблизив тем самым модельную систему к проблеме реального жидкого гелия, аппроксимировал фурье-образ потенциала взаимодействия частиц $\nu(q)$ соответствующим матричным элементом t -матрицы рассеяния (см. обсуждение этой процедуры в гл. 1, § 3, п. п)), который в приближении малых значений переданного импульса $2r_0q/\hbar \ll 1$ можно выразить через длину рассеяния a . С формальной точки зрения эта процедура эквивалентна замене функции $\nu(q)$ на константу,

$$\nu(q) \rightarrow \nu(0) = \nu = \lim_{q \rightarrow 0} (\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}' - \mathbf{q} | t | \mathbf{p}', \mathbf{p}) = \frac{2\pi a \hbar^2}{m}.$$

Не возвращаясь сейчас к обсуждению вопроса о том, насколько адекватна подобная замена реального взаимодействия атомов гелия (размер атомов которого порядка $2r_0 \sim 2,5 \text{ \AA}$, среднее расстояние между ними $\sqrt[3]{V/N} \sim 3,6 \text{ \AA}$, а радиус взаимодействия $R_0 \sim 4 \text{ \AA}$) решением квантово-механической задачи о рассеянии друг

на друге в пустом пространстве двух конечноразмерных частиц (что с физическо точки зрения можно было бы оправдать только в приближении низкой плотност $\sqrt[3]{V/N} \gg 2r_0$), отметим сразу, что боголюбовский корень $E(p)$ вполне допускает по добную формальную замену. Однако при этом было совершенно упущено из виду, чт сама бозе-система как равновесная термодинамическая система при подобной «ап проксимации» перестает существовать вследствие расходимости энергии основног состояния: согласно пункту а) этого параграфа

$$\Delta E_0^{(2)} \Big|_{\nu(q)=\nu(0)} = -N \frac{nm}{4\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \nu^2(q) dq \Big|_{\nu(q)=\nu(0)} = \infty.$$

Неприятности не обошли стороной и сам «модифицированный» Ландау боголюбовский спектр $E(p)$: как заметил Л. П. Питаевский, спектр

$$E'(p) = \sqrt{E_p (E_p + 2n_0 \nu(0))}$$

в своей фоновой части неустойчив по отношению к распаду этого возбужденного состояния на два себе подобных. Остановимся на этом чисто кинематическом эффекте подробнее.

Рассмотрим ситуацию: возбужденное состояние (или «квазичастица»), характеризуемое импульсом \mathbf{p} и энергией $E(p)$, самопроизвольно без какого-либо внешнего на него воздействия распадается на два себе подобных (см. рис. 29). Тогда для соотношений импульсов и энергий этих возбуждений имеем законы сохранения

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad E(p) = E(p_1) + E(p_2) + \Delta,$$

и если для каких-либо значений угла ϑ величина $\Delta > 0$, то такой распад «энергетически выгоден» и может поэтому произойти спонтанно (если к тому нет каких-либо квантовых запретов), т. е. такое возбуждение $E(p)$ потенциально неустойчиво по отношению к распаду на несколько себе подобных.

Если же для любых значений ϑ величина $\Delta < 0$, то подобный распад «энергетически невыгоден» и может произойти только вынужденно, т. е. такая форма дисперсионной зависимости энергии возбужденного состояния от импульса $E(p)$ обеспечивает его устойчивость по отношению к самопроизвольному распаду на несколько возбуждений.

Например, для идеальных фононов имеем,

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad E(p) = cp = cp_1 + cp_2 + \Delta,$$

где величина $\Delta < 0$ для всех значений угла ϑ , кроме $\vartheta = 0$, когда $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}$ и $\Delta = 0$.

Упомянутая устойчивость и неустойчивость легко усматривается по внешнему виду графика $E(p)$ (см. рис. 30): если $E(p) = cp(1 + \gamma p^2)$, где $\gamma > 0$, то не исключено, что при некоторых значениях ϑ величина $\Delta > 0$, и такое возбуждение в области малых значений импульса в упомянутом выше смысле неустойчиво; если же $E(p) = cp(1 - \gamma p^2)$, где $\gamma > 0$, то такие возбужденные состояния устойчивы всегда.

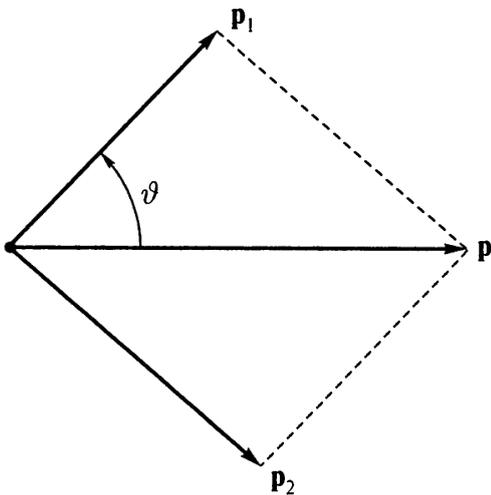


Рис. 29. Кинематическая схема самопроизвольного распада возбужденного состояния с импульсом \mathbf{p} на два себе подобных с импульсами \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2

Согласно рис. 25 (см. п. а) этого параграфа), в модельной (без динамических трудностей) бозе-системе фурье-образ потенциала взаимодействия частиц $\nu(p)$ интегрируем, всегда конечен, четен относительно своего аргумента,

$$\nu(-p) = \nu(p),$$

при $p > \hbar/R_0$ обращается в нуль, а при малых значениях импульса передачи ведет себя как

$$\nu(p) = \nu(0) - kp^2.$$

Тогда в области

$$p \ll \sqrt{4mn_0\nu(p)}$$

боголюбовский спектр $E(p)$ с поправкой к фоновому результату ведет себя как

$$E(p) = p\sqrt{\frac{n_0\nu(0)}{m}} \left(1 - \frac{1}{2\nu(0)} \left(k - \frac{1}{4mn_0} \right) p^2 + \dots \right),$$

и его устойчивость реализуется в случае, когда

$$2n_0(\nu(0) - \nu(p)) \cong 2n_0kp^2 > \frac{p^2}{2m},$$

т. е. спадание функции $\nu(p)$ с увеличением p должно происходить достаточно интенсивно по сравнению с ростом $E(p) = p^2/(2m)$, что совершенно необходимо (см. рис. 27) для образования характерного провала в спектре $E(p)$ (в терминологии Ландау — ротонной ямы) в области исчезновения функции $\nu(p)$ (т. е. при $p \gtrsim \hbar/R_0$).

В связи со сказанным выше, следует отметить, что, в отличие от исходной формы боголюбовского спектра возбуждений $E(p)$, предложенная Ландау его модификация $\nu(q) \rightarrow 2\pi a_0 \hbar^2/m$ (и, следовательно, $k = 0$) условию устойчивости по Питаевскому не удовлетворяет.

Выяснив основные особенности зависимости энергии возбужденных состояний модельной бозе-системы $E(p)$ от импульса (см. рис. 27), рассмотрим вопрос о том, удовлетворяет ли этот спектр известному критерию Ландау существования сверхтекучего состояния системы.

Критерий сверхтекучести в оригинальном изложении Ландау (повторяемый почти буквально во многих руководствах по статистической физике) основан на галилеевом преобразовании энергии движущейся с постоянной скоростью u системы к системе отсчета неподвижного наблюдателя. Основанная целиком на кинематическом построении, аргументация Ландау, по своей идее предназначавшаяся для рассмотрения движения жидкого гелия по неподвижному капилляру, может быть слово в слово повторена по отношению к тому же гелию, запаянному в трубочку, которая движется относительно наблюдателя с той же постоянной скоростью u . И если течение гелия с нулевой вязкостью по капилляру (или по пленке, или через узкую щель) обнаруживает критическую скорость, то в запаянной трубочке, катающейся мимо нас на колесиках с любой скоростью, никаких изменений состояния содержащегося в ней гелия не происходит. Чтобы избежать этого недоразумения, связанного с полным отсутствием динамического компонента в рассуждении Ландау, рассмотрим вопрос о критической

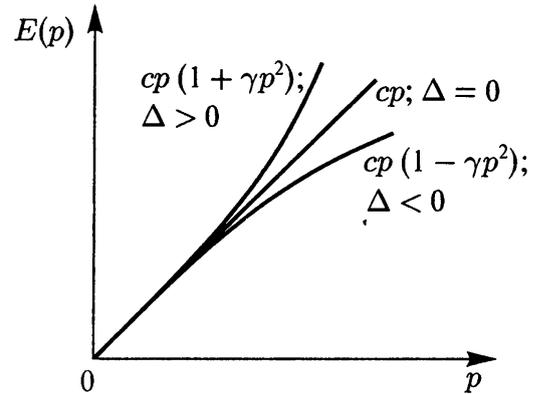


Рис. 30. Визуальный критерий кинематической устойчивости возбужденных состояний системы в области малых значений импульса

скорости протекания системы в статистическом варианте (кстати, использованном Боголюбовым в его известных украинских лекциях по квантовой статистике 1949 г.).

Напомним в связи с этим некоторые исходные моменты равновесной статистической теории. Прежде всего, когда мы говорим: «система в термостате», то под термостатом подразумеваем не какую-то надфизическую субстанцию или условный объект, независимо «наблюдающий» за интересующей нас системой, а тоже термодинамическую систему, находящуюся в равновесном состоянии с исследуемой термодинамической системой (см. т. 1 и т. 2) и благодаря принципиально существующему и неистребимому флуктуационному обмену энергиями через теплопроводящую границу между ними (напомним, что дисперсия энергии системы, связанная с ее контактом с термостатом $\overline{(\Delta E)^2} = N\theta^2 c_{VN} \neq 0$) обеспечивающую в ней устойчивую гиббсовскую структуру смешанного состояния, характеризуемую статистическим оператором

$$\rho = \frac{e^{-H/\theta}}{\text{Sp } e^{-H/\theta}}.$$

Напомним еще, что в упомянутых выше руководствах по термодинамике и статистической физике (см. т. 1 и т. 2), посвященных равновесной статистической теории, рассматривались системы, в целом неподвижные относительно термостата (так как необходимости в рассмотрении движущихся относительно него систем просто не возникало), который обеспечивал и измерял не только определенное значение температуры системы, но являлся по отношению к ней, по существу, измерительным прибором, фиксирующим все характеризующие ее макроскопические параметры состояния. В связи с этой неподвижностью равновесной системы относительно термостата структура ее смешанного состояния определялась только одним общим интегралом движения — гамильтонианом H , в то время как другие сохраняющиеся величины, такие, в частности, как момент импульса всей системы и полный ее импульс, от которых должно было зависеть стационарное решение уравнения фон Неймана—Лиувилля, в случае неподвижной относительно термостата системы выпали из рассмотрения вследствие нулевых коэффициентов при них.

Оставляя в покое вращение системы как целого, рассмотрим случай, когда система равномерно движется относительно находящегося с ней в тепловом контакте неподвижного термостата (роль которого могут играть стенки капилляра), и, чтобы не заимствовать готовые результаты этого рассмотрения из авторитетных источников, начнем его с самых исходных позиций.

Если в неподвижной системе кинетическая энергия отдельной частицы равна $T(\mathbf{p}_i) = p_i^2/(2m)$, и эта система движется со скоростью \mathbf{u} относительно наблюдателя (в нашем случае — это термостат с полным комплектом измерительных приборов), то относительно него в галилеевом приближении энергия будет равна

$$T^{(u)}(\mathbf{p}_i) = \frac{(\mathbf{p}_i - m\mathbf{u})^2}{2m} = \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\mathbf{u}^2}{2} - \mathbf{u}\mathbf{p}_i,$$

и поэтому нулевой гамильтониан движущейся системы из N одинаковых частиц будет иметь вид

$$H_0^{(u)} = \sum_{1 \leq i \leq N} T^{(u)}(\mathbf{p}_i) = N \frac{m\mathbf{u}^2}{2} + H_0 - \mathbf{u}\mathbf{I},$$

где $H_0 = \sum_{1 \leq i \leq N} \frac{p_i^2}{2m}$ — нулевой гамильтониан неподвижной системы, $\mathbf{I} = \sum_{1 \leq i \leq N} \mathbf{p}_i$ — полный импульс системы.

Так как потенциал взаимодействия частиц друг с другом $\Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ и соответственно функция $\nu(\mathbf{q})$ не реагируют на движение всей системы N частиц как целого, то

$$H^{(u)} = H_0^{(u)} + H_1 = N \frac{mu^2}{2} + H - uI.$$

Учитывая, что появляющаяся в экспоненте статистических распределений энергия $Nmu^2/2$ сокращается с соответствующим множителем из нормировки, получаем для статистического оператора фон Неймана

$$\rho^{(u)} = \frac{e^{-H^{(u)}/\theta}}{\text{Sp } e^{-H^{(u)}/\theta}} = \frac{e^{-(H-uI)/\theta}}{\text{Sp } e^{-(H-uI)/\theta}}.$$

В рассматриваемом в данном параграфе случае точно решаемой модельной системы мы получили для гамильтониана уже в диагонализированном виде

$$H_{\text{мод}} = \sum_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}) \xi_{\mathbf{p}}^+ \xi_{\mathbf{p}},$$

оператор же полного импульса всей системы в том же представлении вторичного квантования (см. гл. 1, § 3, п. и) имеет вид

$$I = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{p} \xi_{\mathbf{p}}^+ \xi_{\mathbf{p}}$$

(обе записи оператора I эквивалентны не только по своему физическому смыслу, но и формально, в чем легко убедиться, пересчитав с помощью $(u-v)$ -преобразования операторы a к операторам ξ и приняв во внимание четность и нечетность выражений, стоящих под знаком суммы по \mathbf{p}).

Таким образом, статистический оператор, определяющий смешанное состояние движущейся относительно термостата равновесной бозе-системы, сохраняет структуру статистического оператора идеального бозе-газа

$$\rho_{\text{мод}}^{(u)} = \frac{\exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{\mathbf{p}} (E(\mathbf{p}) - \mathbf{p}u) \xi_{\mathbf{p}}^+ \xi_{\mathbf{p}} \right\}}{\text{Sp } \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{\mathbf{p}} (E(\mathbf{p}) - \mathbf{p}u) \xi_{\mathbf{p}}^+ \xi_{\mathbf{p}} \right\}},$$

откуда следует стандартное выражение для средних чисел заполнения идеальной бозе-системы

$$\tilde{n}_{\mathbf{p}}(u) = \langle \xi_{\mathbf{p}}^+ \xi_{\mathbf{p}} \rangle^{(u)} = \frac{1}{e^{(E(\mathbf{p}) - \mathbf{p}u)/\theta} - 1}.$$

Совершенно ясно, что средние значения (рассчитанные в данном случае с помощью канонического распределения) от неотрицательных величин, которыми являются числа заполнения, не могут быть меньше нуля. А это возможно только в том случае, если при любых значениях импульса \mathbf{p}

$$E(\mathbf{p}) - \mathbf{p}u > 0.$$

Если это условие нарушается хотя бы для некоторых значений \mathbf{p} , то перестает существовать термодинамический потенциал системы (расходятся соответствующие геометрические прогрессии, см. т. 2, гл. 2, § 1), а вместе с тем перестает существовать

и устойчивое равновесное состояние такой системы. Так как величина $E(p) > 0$, то условие стабильного существования движущейся относительно термостата (т. е. относительно термодинамической системы, находящейся с ней в постоянном тепловом контакте) системы, сохраняющей все качества и свойства равновесной статистической системы, превращается в критерий, ограничивающий величину модуля скорости $u = |u|$ максимально допустимым для него критическим значением

$$\min_{(p)} \frac{E(p)}{|p|} = u^* > 0.$$

Это условие существования неразрушаемого термостатом термодинамического состояния системы, движущейся относительно него со скоростью $u = |u| < u^*$, и называется условием сверхтекучести Ландау. Спектр $E(p)$, изображенный на рис. 27 (а также и варианты, приведенные на рис. 28),

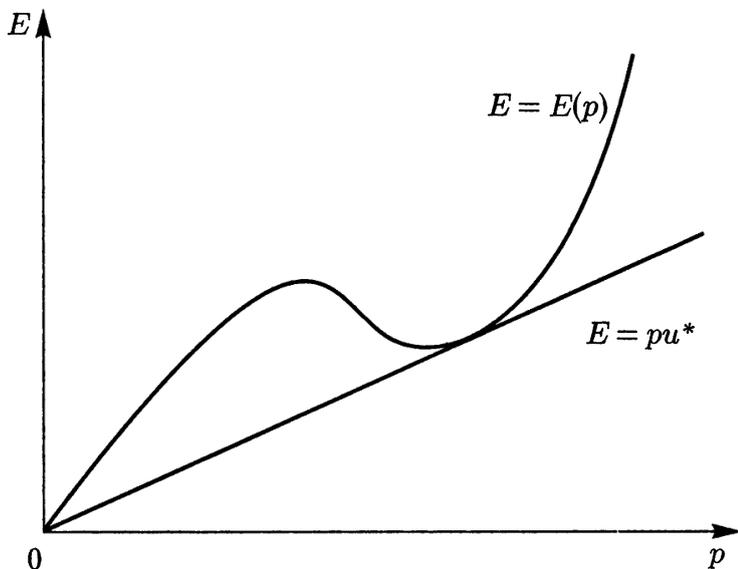


Рис. 31. Графическое определение критической скорости u^* : условие минимальной относительно p величины

$$\min_{(p)} (E(p) - pu^*) = 0$$

означает, что прямая pu^* должна коснуться снизу графика функции $E(p)$

удовлетворяют этому критерию (см. рис. 31) в отличие от идеального газа $E_p = p^2/(2m)$, для которого $u^* = 0$, и бездиссипационное движение которого относительно неподвижного термостата (т. е. стенок, ограничивающих систему) невозможно.

Интерпретация критической скорости u^* как скорости сверхтекучего движения гелия ниже λ -точки достаточно спорна. Специалисты, знакомые с проблемами аэродинамики, усматривают в ней скорость, связанную с возникновением ударной волны. Любой сельский житель, хозяйство которого расположено не слишком далеко от испытательного аэродрома, прекрасно знает, что это такое. По утверждению специалистов, работающих

в криогенной области, скорость движения сверхтекучего гелия-II (имеющая порядок десятка см/с) в тысячу раз меньше критической u^* , определенной по критерию Ландау (см. рис. 31), так что в этом вопросе остается еще много нерешенных проблем.

В заключение обсуждения особенностей спектра возбужденных состояний бозе-системы приведем полученные с помощью экспериментов по рассеянию нейтронного пучка на жидком гелии-4 (см. гл. 3, § 4, п. а)) зависимости резонансных частот (т. е. энергий возбужденных состояний, представленных на рис. 32 в кельвинах) от волнового числа (т. е. от импульса, представленного в масштабе $\text{Å}^{-1} = 10^8 \text{ см}^{-1}$) с характерным «ротонным» провалом, впервые экспериментально промеренным в 1961 г. (Heushaw and Woods) и подтвержденным в дальнейших экспериментах, и с обязательной фононной частью этого спектра. На рис. 32 пунктиром помечены также слабые и достаточно размытые резонансы, обнаруженные выше основной дисперсионной кривой, причина возникновения которых и их природа в такой сложной динамической бозе-системе, как жидкий гелий-II, находится в стадии обсуждения.

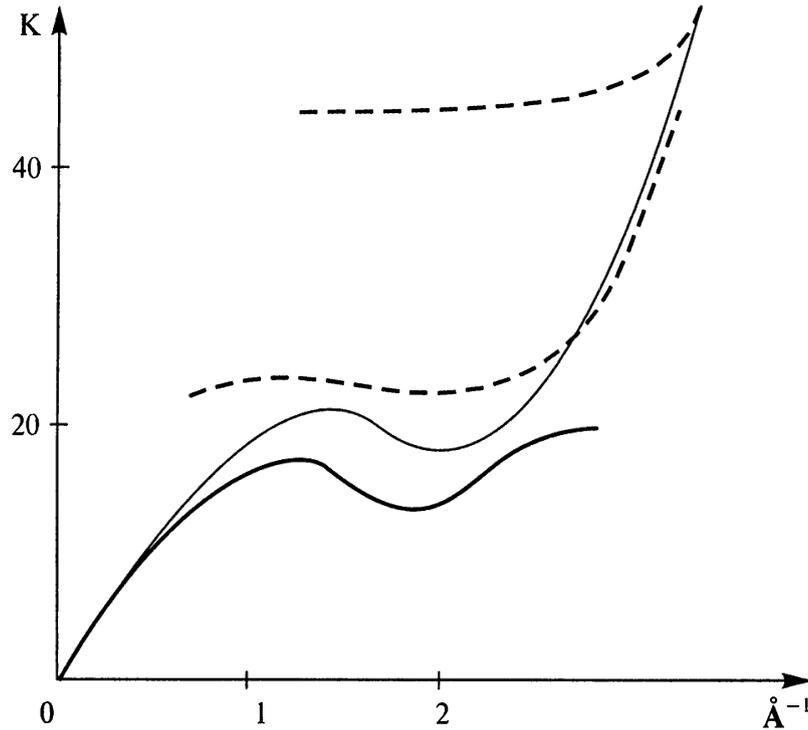


Рис. 32. Зависимость энергии возбужденных состояний гелия-II от импульса, полученная на основе обработки экспериментальных данных по рассеянию редкого пучка нейтронов на жидком гелии (толстая линия) и график функции $E(p)$ (тонкая линия), совмещенный с экспериментом в фоновой области. Пунктирными линиями обозначены обнаруженные в системе побочные слабые резонансы

2. Динамическое размытие конденсата

Чтобы определить распределение по импульсам частиц неидеальной бозе-системы, достаточно проинтегрировать по частоте полученную в пункте в) этого параграфа спектральную плотность $J(a_p^+, a_p; \omega)$. Итак, в общем случае

$$\begin{aligned} n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} J(a_p^+, a_p; \omega) d\omega = \\ &= \frac{E_p + n_0 \nu(p) - E(p)}{2E(p)} + \frac{E_p + n_0 \nu(p)}{E(p)} \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1}, \end{aligned}$$

откуда, в частности, следует поведение этого распределения в случае больших значений импульса $p \rightarrow \infty$ ($p^2/(2m) \gg 2n_0 \nu(p)$),

$$\begin{aligned} n_p|_{p \rightarrow \infty} &\cong \frac{n_0^2 \nu^2(p)}{4E_p^2} + \left(1 + \frac{n_0^2 \nu^2(p)}{2E_p^2}\right) \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1} \cong \\ &\cong \frac{n_0^2 \nu^2(p)}{4E_p^2} + \left(1 + \frac{n_0^2 \nu^2(p)}{2E_p^2}\right) e^{-p^2/(2m\theta)} \left(1 - \frac{n_0 \nu(p)}{\theta}\right), \end{aligned}$$

и в случае $p \rightarrow 0$ ($p^2/2m \ll 2n_0 \nu(p)$),

$$n_p|_{p \rightarrow 0} \cong \frac{\sqrt{n_0 \nu(0)m}}{2p} + \frac{\sqrt{n_0 \nu(0)m}}{p} \frac{1}{e^{pc/\theta} - 1} \cong$$

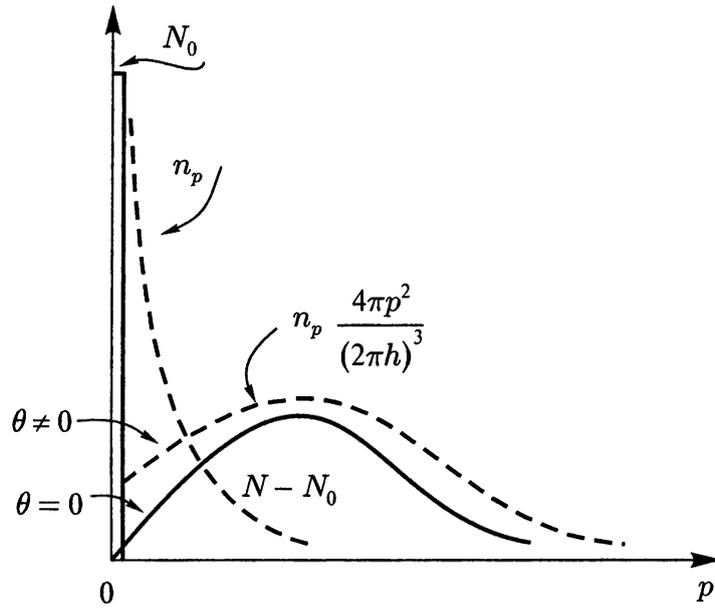


Рис. 33. Распределение по импульсу среднего числа частиц неидеальной бозе-системы. Площадь, ограниченная сплошной линией над осью p , определяет число внеконденсатных частиц в системе в случае $\theta = 0$

$$\cong \begin{cases} \frac{\sqrt{n_0\nu(0)m}}{2p} + \frac{m\theta}{p^2} & \text{в случае } pc \ll \theta, \\ \frac{\sqrt{n_0\nu(0)m}}{2p} (1 + 2e^{-pc/\theta}) & \text{в случае } pc \gg \theta, \end{cases}$$

где $c = \sqrt{n_0\nu(0)/m}$. Зависимость от импульса средних чисел заполнения для исходных частиц системы n_p , а также величины $n_p \cdot 4\pi p^2 / (2\pi\hbar)^3$, фигурирующей в интегральных соотношениях, представлены на рис. 33.

Распределение по импульсу среднего числа возбуждений неидеальной бозе-системы (именуемых часто квазичастицами), характеризуемых энергетическим спектром $E(p)$, имеет совершенно иной вид (см. рис. 34): тут нет никакого конденсата, число возбуждений (т. е. квазичастиц) не фиксировано (химический потенциал принципиально отсутствует) и определяется площадью, ограниченной графиком функции $\tilde{n}_p \cdot 4\pi p^2 / (2\pi\hbar)^3$ над осью p , где

$$\tilde{n}_p = \langle \xi_p^+ \xi_p \rangle = \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1},$$

$$\tilde{n}_p|_{p \rightarrow \infty} \cong e^{-p^2/(2m\theta)} \left(1 - \frac{n_0\nu(p)}{\theta} \right) \quad \text{в случае } \frac{p^2}{2m} \gg 2n_0\nu(p),$$

$$\tilde{n}_p|_{p \rightarrow 0} \cong \frac{1}{e^{pc/\theta} - 1} \cong \begin{cases} \frac{\theta}{pc}, & \theta \gg pc \\ e^{-pc/\theta}, & \theta \ll pc \end{cases} \quad \text{в случае } \frac{p^2}{2m} \ll 2n_0\nu(p).$$

Представленные выше распределения по импульсу величин $n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle$ и $\tilde{n}_p = \langle \xi_p^+ \xi_p \rangle$ (см. рис. 33 и 34) существенно отличаются от распределения $(n_p)_{ид} = \langle a_p^+ a_p \rangle^{(0)}$ для вырожденного идеального нерелятивистского газа (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. г)) вследствие

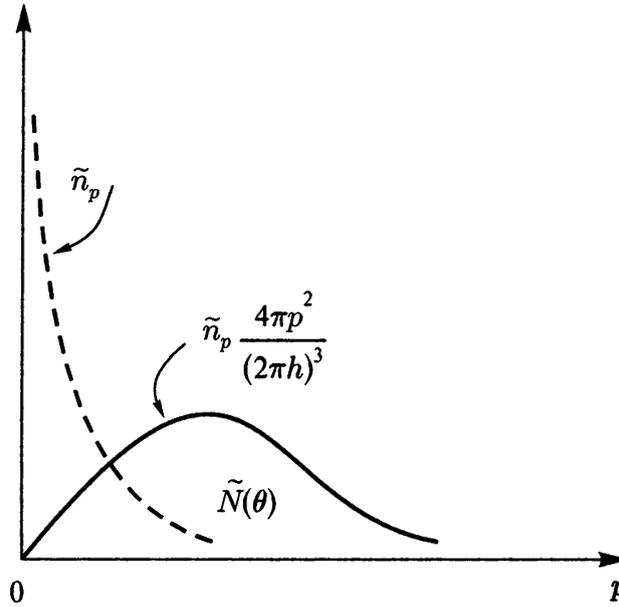


Рис. 34. Распределение по импульсу среднего числа возбужденных состояний (квазичастиц) в неидеальном бозе-газе. Площадь, ограниченная сплошной линией над осью p , определяет число возбужденных состояний $\tilde{N}(\theta)$, которое в пределе $\theta \rightarrow 0$ обращается в нуль

фононного характера спектра $E(p)$ в области малых значений импульса. Кроме того, в случае идеального газа отсутствовало динамическое размытие конденсата, и в случае $\theta = 0$ мы имели $N_0 = N$ и $n_p^{(0)} = 0$.

Определим теперь число частиц N_0 , образующих в случае $\theta = 0$ конденсат в неидеальной бозе-системе. Имеем согласно общей постановке модельной задачи (см. п. б) этого параграфа)

$$\begin{aligned} N_0 &= N - \sum_p n_p = N - \sum_p \frac{E_p + n_0 \nu(p) - E(p)}{2E(p)} = \\ &= N \left(1 - \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 n} \int_0^\infty p^2 dp \frac{\frac{p^2}{2m} + n_0 \nu(p) - \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2n_0 \nu(p) \right)}}{2\sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2n_0 \nu(p) \right)}} \right), \end{aligned}$$

где $n = N/V$. Так как этот интеграл, конечно же, не берется, исследуем его асимптотику в случае $\nu(0) = \nu \rightarrow 0$. Разлагая в ряд подынтегральное выражение по степеням $\nu(p)$ (как в теории возмущений п. а)), обнаруживаем, что первый порядок по ν отсутствует, а начиная со второй степени, весь интеграл расходится на нижнем пределе,

$$-\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 n} \int_0^\infty \left(\frac{n_0^2 \nu^2(p)}{2E_p} \right) p^2 dp \sim \nu^2 \int_0^\infty \frac{dp}{p^2} = \infty.$$

Не усматривая в этом факте трагедии, мы осознаем, что реальная зависимость величины $N - N_0$ от ν находится где-то между ν и ν^2 . Чтобы выявить эту особенность, преобразуем выражение для $N - N_0$, введя безразмерную переменную интегрирования

$$x^2 = \frac{p^2}{2m} / 2n_0 \nu(0); \quad E(p) = 2n_0 \nu(0) x \sqrt{x^2 + \frac{\nu(p)}{\nu(0)}}$$

(заметим, что это не только переход к безразмерной переменной интегрирования $p \rightarrow x$, но и в асимптотическом смысле $\nu \rightarrow 0$ масштабное преобразование типа ее растяжки).

Обозначая $\nu(0) = \nu$, получаем

$$N_0 = N \left(1 - \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 n} \cdot 4(mn_0\nu)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^2 + \frac{1}{2} \frac{\nu(p)}{\nu} - x \sqrt{x^2 + \frac{\nu(p)}{\nu}}}{\sqrt{x^2 + \frac{\nu(p)}{\nu}}} x dx \right).$$

Желая определить первую исчезающую по ν асимптотику этого выражения, заметим, что при конечных значениях переменной x

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \nu(p) = \lim_{\nu \rightarrow 0} \nu(2\sqrt{mn_0\nu}x) = \nu(0) = \nu.$$

При больших же значениях переменной x , когда $x \rightarrow \infty$, имеем $\nu(p) \rightarrow 0$, но это оказывается уже несущественным, так как интеграл на больших x сходится в силу только конструкции своего подынтегрального выражения раньше, чем величина $\nu(p)$ успеет обратиться в нуль,

$$\begin{aligned} \frac{x^2 + \frac{1}{2} \frac{\nu(p)}{\nu} - x^2 - \frac{1}{2} \frac{\nu(p)}{\nu} + \frac{1}{8} \left(\frac{\nu(p)}{\nu} \right)^2 \frac{1}{x^2} - \dots}{x} x dx \Big|_{\nu \rightarrow 0} &= \\ &= \frac{1}{8} \left(\frac{\nu(p)}{\nu} \right)^2 \frac{dx}{x^2} - \dots \Big|_{\nu \rightarrow 0} = \frac{1}{8} \frac{dx}{x^2} - \dots \end{aligned}$$

Заменяя под интегралом $\nu(p)/\nu \rightarrow 1$ и учитывая, что

$$\int_0^\infty \frac{x^2 + \frac{1}{2} - x\sqrt{x^2 + 1}}{\sqrt{x^2 + 1}} x dx = \frac{1}{6},$$

получаем для числа частиц в конденсате

$$N_0 = N \left(1 - \frac{1}{3} \frac{m^{3/2} n^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \nu^{3/2} - \dots \right)$$

с характерной зависимостью $\nu^{3/2}$ плотности числа конденсатных частиц

$$n_0 = n - \alpha \nu^{3/2} + \dots$$

Только ради математического интереса получим следующий член асимптотического разложения для динамического размывания бозе-конденсата $N - N_0$ по параметру ν . Заметим, что член, пропорциональный $\nu^{3/2}$, получается в точности из исходного выражения для N_0 , если в нем заменить $\nu(p)$ на $\nu(0) = \nu$. Вычтем из исходного точного выражения для N_0 выражение $N|_{\nu^{3/2}}$, полученное в приближении $\nu(p) = \nu$, пропорциональное $\nu^{3/2}$, и разложим эту разность по степеням $\nu(p)$ для исходного выражения и по степеням ν — для вычитаемого из него. Тогда в качестве старших членов разложения останутся только члены, пропорциональные $\nu^2(p)$ и $\nu^2(0) = \nu^2$:

$$\frac{1}{N} N_0 \Big|_{\nu^2} = - \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 n} \int_0^\infty \left(\frac{n_0^2 \nu^2(p)}{4E_p^2} - \frac{n_0^2 \nu^2(0)}{4E_p^2} \right) p^2 dp = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3 n} m^2 n_0^2 \int_0^\infty \frac{\nu^2(0) - \nu^2(p)}{p^2} dp,$$

и мы практически задаром получаем помимо основного также и следующий член асимптотического разложения числа частиц в конденсате по параметру ν , характеризующему взаимодействие частиц бозе-системы друг с другом,

$$N_0 = N \left(1 - \frac{1}{3} \frac{m^{3/2} n^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \nu^{3/2} + \frac{m^2 n^2}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\nu^2(0) - \nu^2(p)}{p^2} dp + \dots \right).$$

3. Асимптотика энергии основного состояния

Используя разработанную в предыдущем пункте методику построения асимптотического разложения, исследуем зависимость от ν энергии основного состояния модельной бозе-системы

$$\mathcal{E}_0 = \frac{N(N-1)}{2V} \nu(0) + \frac{1}{2} \sum_p (E(p) - E_p - n_0 \nu(p)).$$

Учитывая, что

$$\sqrt{E_p(E_p + 2n_0 \nu(p))} - E_p - n_0 \nu(p) = -n_0^2 \frac{\nu^2(p)}{2E_p} + n_0^3 \frac{\nu^3(p)}{2E_p^2} - \dots,$$

убеждаемся в том, что два первых порядка разложения величины \mathcal{E}_0 по степеням ν имеют конечные коэффициенты,

$$\mathcal{E}_0^{(1)} = N \frac{n\nu(0)}{2}; \quad \mathcal{E}_0^{(2)} = -\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{1}{2} n_0^2 4\pi \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{p^2/m} \nu^2(p) = -N \frac{2\pi m n}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \nu^2(p) dp$$

(напомним еще раз, что в выражении для конечной в принципе величины $\mathcal{E}_0^{(2)}$ нельзя делать замену $\nu(p) \rightarrow \nu(0) = 2\pi a \hbar^2/m$), а третий член формального разложения по ν , как это и должно было произойти в соответствии с исследованием, проведенным в пункте а) этого параграфа, расходится на нижнем пределе интегрирования по модулю импульса (знакомый по предыдущему пункту характер расходимости),

$$\mathcal{E}_0^{(3)} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{1}{2} n_0^3 4\pi \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{2(p^2/(2m))^2} \nu^3(p) = N \frac{m^2 n^2}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \nu^3(p) \frac{dp}{p^2} \sim \int_0^\infty \frac{dp}{p^2} = \infty,$$

а это означает, что следующий за вторым член асимптотического разложения энергии основного состояния \mathcal{E}_0 по ν является более сильным, чем ν^3 (но слабее конечного вклада второго порядка, пропорционального ν^2). Вычитая из общего выражения для \mathcal{E}_0 регулярную часть первого и второго по ν порядков,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}'_0 &= \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_0^{(1)} - \mathcal{E}_0^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_p \left(E(p) - E_p - n_0 \nu(p) + n_0^2 \frac{\nu^2(p)}{2E_p} \right) = \\ &= N \frac{4\pi}{2(2\pi\hbar)^3 n} \int_0^\infty p^2 dp \left\{ \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2n_0 \nu(p) \right)} - \frac{p^2}{2m} - n_0 \nu(p) + n_0^2 \frac{\nu^2(p)}{p^2/m} \right\}, \end{aligned}$$

определим главную асимптотику этого остатка в пределе $\nu \rightarrow 0$. Полагая, как и в предыдущем пункте, $p = x \sqrt{2m n_0 \nu}$, получаем выражение, включающее интеграл

по безразмерной переменной x , который, вследствие того что при больших значениях переменной $x \gg 1$

$$x^2 \sqrt{1 + \frac{\nu(p)}{\nu} \frac{1}{x^2}} = x^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\nu(p)}{\nu} \frac{1}{x^2} - \frac{1}{8} \frac{\nu^2(p)}{\nu^2} \frac{1}{x^4} + \frac{1}{16} \frac{\nu^3(p)}{\nu^3} \frac{1}{x^6} - \dots \right),$$

сходится на верхнем пределе вне зависимости от поведения функции

$$\nu(p) = \nu(2\sqrt{mn_0\nu}x),$$

$$\int \frac{1}{16} \frac{\nu^3(p)}{\nu^3} \frac{1}{x^4} x^2 dx \Big|_{\nu \rightarrow 0} \stackrel{\text{as}}{=} \int \frac{1}{16} \frac{dx}{x^2}.$$

Поэтому, как и при расчете асимптотики величины N_0 , заменив $\nu(p)/\nu$ на единицу и рассчитав несложный интеграл

$$\int_0^{\infty} \left(x\sqrt{x^2+1} - x^2 - \frac{1}{2} + \frac{1}{8} \frac{1}{x^2} \right) x^2 dx = \frac{2}{15},$$

получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{E}'_0 \Big|_{\nu \rightarrow 0} \stackrel{\text{as}}{=} N \frac{4\pi}{2(2\pi\hbar)^3 n} 8(mn_0\nu)^{3/2} \times \\ \times 2n_0\nu \int_0^{\infty} \left(x\sqrt{x^2+1} - x^2 - \frac{1}{2} + \frac{1}{8} \frac{1}{x^2} \right) x^2 dx = N \frac{8n^{3/2}m^{3/2}}{15\pi^2\hbar^3} \nu^{5/2}. \end{aligned}$$

Таким образом, асимптотическое разложение энергии основного состояния неидеальной бозе-системы \mathcal{E}_0 по величине ν приобретает вид

$$\mathcal{E}_0 = N \left\{ \frac{n\nu}{2} - \frac{mn}{4\pi^2\hbar^3} \int_0^{\infty} \nu^2(p) dp + \frac{8n^{3/2}m^{3/2}}{15\pi^2\hbar^3} \nu^{5/2} + O(\nu^3) \right\},$$

причем член третьего порядка этого разложения по ν можно получить практически задаром с помощью приема, использованного при получении поправки второго порядка в разложении величины N_0 , вычитая друг из друга расходящиеся на нижнем пределе интегрирования по p выражения формально полученных членов разложения третьего порядка для систем, характеризуемых величинами $\nu(p)$ и $\nu(0) = \nu$,

$$\mathcal{E}_0^{(3)} = N \frac{4\pi}{2(2\pi\hbar)^3 n} \int_0^{\infty} p^2 dp \left\{ n_0^3 \frac{\nu^3(p)}{2E_p^2} - n_0^3 \frac{\nu^3(0)}{2E_p^2} \right\} = N \frac{m^2 n^2}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3(p) - \nu^3(0)}{p^2} dp.$$

Построение следующих членов асимптотического разложения величин N_0 (за ν^2 -м членом следует $\nu^{5/2}$ и т. д.) и \mathcal{E}_0 (за ν^3 -м членом следует $\nu^{7/2}$ и т. д.) несложно, но это уже не имеет физического смысла, так как отброшенные при построении модельного гамильтониана в пункте б) этого параграфа члены полного гамильтониана неидеальной бозе-системы (в частности, часть H_1'' , слагаемые которой содержат по одному оператору с нулевым значением импульса) начнут давать к величинам N_0 и \mathcal{E}_0 , вычисленным в модельном боголюбовском приближении, в этих более высоких порядках по ν поправки конкурирующей величины.

Полученное выше выражение для энергии основного состояния \mathcal{E}_0 позволяет без использования каких-либо аппроксимационных процедур получить еще и дополнительные сведения о рассматриваемой системе.

Прежде всего заметим, что это выражение для \mathcal{E}_0 позволяет почти сразу определить качественное видоизменение парной корреляционной функции $F_2(R)$ бозе-газа (см. гл. 1, § 4, п. е)), связанное с учетом взаимодействия его частиц. Так как в случае $\theta = 0$ свободная энергия системы $\mathcal{F}(\theta, V, N)|_{\theta=0} = \mathcal{E}_0$, то

$$\begin{aligned} F_2(R)|_{\theta=0} &= \frac{2v}{N} \frac{\delta \mathcal{F}(\theta, V, N)}{\delta \Phi(R)} \Big|_{\theta=0} = \frac{2v}{N} \frac{\delta \mathcal{E}_0}{\delta \Phi(R)} = \\ &= \frac{\delta \nu(0)}{\delta \Phi(R)} - \frac{m}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\delta}{\delta \Phi(R)} \nu^2(p) dp + \frac{16m^{3/2} n^{1/2} \delta \nu^{5/2}(0)}{15\pi^2 \hbar^3 \delta \Phi(R)} + \dots \end{aligned}$$

Учитывая, что

$$\frac{\delta \nu(q)}{\delta \Phi(R)} = \frac{\delta}{\delta \Phi(R)} \int \Phi(R) e^{i\frac{qR}{\hbar}} d\mathbf{R} = e^{i\frac{qR}{\hbar}}, \quad \frac{\delta \nu(0)}{\delta \Phi(R)} = 1, \quad \frac{\delta \nu^{5/2}(0)}{\delta \Phi(R)} = \frac{5}{2} \nu^{3/2}(0),$$

восстанавливая во втором слагаемом выражения для $F_2(R)$ тройной интеграл по импульсу \mathbf{p} , взяв производную по $\delta \Phi(R)$ и проинтегрировав оставшийся интеграл по углам, получим

$$F_2(R)|_{\theta=0} = 1 - \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi\hbar}{R} \int_0^\infty \nu(q) \frac{1}{q} \sin \frac{qR}{\hbar} dq + \frac{8m^{3/2} n^{1/2} \nu^{3/2}(0)}{3\pi^2 \hbar^3} + \dots$$

Учитывая, что для больших значений R , таких, что в пределе $R/\hbar \gg R_0/\hbar$, где R_0 — радиус взаимодействия частиц друг с другом,

$$\frac{1}{\pi q} \sin \frac{qR}{\hbar} \rightarrow \delta(q),$$

получаем, учитывая четность подынтегрального выражения относительно q , оценку

$$\begin{aligned} F_2(R)|_{R \gg R_0} &\cong \left(1 + \frac{8m^{3/2} n^{1/2} \nu^{3/2}(0)}{3\pi^2 \hbar^3} \right) - \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi\hbar}{R} \cdot \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \nu(q) \pi \delta(q) dq = \\ &= F_2(\infty) - \frac{m\nu(0)}{2\pi\hbar^2} \cdot \frac{1}{R}, \end{aligned}$$

выявляющую достаточно «дальнодействующее» поведение парной корреляционной функции вырожденной неидеальной бозе-системы.

В случае малых значений R , таких, что $R \ll R_0$, имеем из общей формулы для $F_2(R)$ естественный результат

$$\begin{aligned} F_2(R)|_{R \ll R_0} &\cong F_2(\infty) - \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int_0^\infty \nu(q) \left(1 - \frac{1}{6} \frac{q^2 R^2}{\hbar^2} \right) dq = \\ &= F_2(\infty) - \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \nu(q) dq + \frac{m\Phi(0)}{3\hbar^2} R^2 = F_2(0) + \frac{m\Phi(0)}{3\hbar^2} R^2, \end{aligned}$$

в котором понижение значения парной корреляционной функции в нуле $F_2(0) - F_2(\infty)$ при самых грубых предположениях о виде функции $\nu(q)$ (или $\Phi(R)$) содержит фактор $-m\Phi(0)R_0^2/\hbar^2$, в области $R \ll R_0$ по модулю значительно превосходящий зависящее от R слагаемое в полученной выше оценке для $F_2(R)$.

Наконец, сделаем небольшие замечания по поводу химического потенциала модельной системы, описываемой квадратичным гамильтонианом Боголюбова. Имеем в случае $\theta = 0$, согласно т. 2, гл. 1, § 3,

$$\mu|_{\theta=0} = \left(\frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial N} \right)_V = n\nu(0) - n \frac{4\pi m}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \nu^2(p) dp + n^{3/2} \frac{4m^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} \nu^{5/2}(0) + \dots$$

Для рассматриваемой нами системы (см. п. а) данного параграфа и рис. 25) эта величина оказывается больше нуля. Однако связывать получающуюся положительную величину химического потенциала μ , который по своему изначальному определению (см. т. 2, гл. 1, § 3) характеризует изменение внутренней энергии системы, связанное с добавлением в нее одной частицы при условии, что система не совершает при этом работы и не получает какого-либо количества тепла, $\mu = (\partial \mathcal{E} / \partial N)_{SV}$, с возникновением неустойчивости бозе-системы (по аналогии с ситуацией в идеальном бозе-газе (см. т. 2, гл. 2, § 1, п. г)), для которого условие $\mu \leq 0$ является критерием его существования как термодинамической системы) вряд ли можно считать разумным. Во-первых, полученное в результате точного решения боголюбовской системы выражение для низкотемпературного поведения внутренней энергии системы

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \sum_p E(p) \frac{1}{e^{E(p)/\theta} - 1}$$

никакой неустойчивости не обнаруживает. Во-вторых, наличие бозе-конденсата исходных частиц $N_0 \sim N$ приводит к качественной перестройке характера возбужденных состояний системы: они становятся коллективными и уже не характеризуются каким-либо «своим» химическим потенциалом (совершенно так же, как для фононов в теории теплоемкости твердого тела по Дебаю или для плазменных колебаний «химического потенциала» просто нет, хотя по отношению к частицам, составляющим твердое тело или плазму, он, конечно, существует). Таким образом, ни о какой кинематической неустойчивости бозе-системы, связанной с положительной величиной химического потенциала, в данном аспекте речи быть не может.

4. Общие выводы

Подводя итоги представленным в этом параграфе исследованиям неидеальной вырожденной бозе-системы, необходимо отметить некоторые характерные моменты всего проведенного рассмотрения в целом.

Метод приближенного вторичного квантования Боголюбова с успехом разрешил связанные с наличием в системе макроскопического бозе-конденсата кинематические трудности, возникающие при исследовании системы стандартными методами теории возмущений, оставив вне рассмотрения особенности динамического плана, характерные для взаимодействия частиц в реальном гелии, которые отмечались нами еще в гл. 1, § 3, п. п). Мы показали, что попытка частичного учета этих особенностей с помощью t -матричной низкоплотностной аппроксимации (что для жидкого гелия совершенно не характерно) в теоретическом отношении убедительной не является.

Метод приближенного вторичного квантования оправдан только в области низких температур по сравнению с температурой исчезновения бозе-конденсата θ_λ .

При приближении к этой точке усиливается роль отброшенных членов исходного гамильтониана, а вблизи θ_λ становятся существенными корреляционные эффекты ближнего упорядочения, которые, собственно, и определяют характер особенности теплоемкости по обе стороны от θ_λ . Учет динамического размывания конденсата (сверхтермического) привел к качественному пониманию снижения величины температуры исчезновения бозе-конденсата в неидеальной бозе-системе по сравнению с идеальным газом (для реального гелия-4 $\theta_\lambda \cong 2,17$ К, а для идеального бозе-газа той же плотности $\theta_0 \cong 3,14$ К).

Как и во всякой точно решаемой квантово-механической задаче, в системе, характеризуемой модельным гамильтонианом, возбужденные состояния являются стационарными. Представляющая несомненный интерес с прикладной точки зрения процедура оценки их времени жизни (или затухания Γ_p), проведение которой возможно только ценой отказа от точно решаемой схемы, должна основываться на привлечении каких-либо динамических факторов, связанных с учетом отброшенных членов гамильтониана и т. д. Однако построение такой супертеории возмущений, в которой в качестве нулевого гамильтониана используется боголюбовское приближение, являющееся результатом суммирования определенной последовательности вкладов стандартной теории возмущений, представляется мало перспективным вследствие неполной ясности физического смысла параметра разложения в такой «двухступенчатой» теории возмущений.

В следующем параграфе мы в обзорном варианте и по возможности кратко остановимся на обсуждении связи метода приближенного вторичного квантования в сочетании с построением модельного гамильтониана, допускающего точное решение статистической задачи, с методом суммирования вкладов от определенного типа диаграмм формальной теории возмущений.

§ 3. Метод приближенного вторичного квантования в системах с парным центральным взаимодействием

В данном параграфе на примере системы с парным центральным взаимодействием частиц друг с другом,

$$H_0 = \sum_p E_p a_p^+ a_p; \quad H_1 = \frac{1}{2V} \sum_q \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p,$$

мы рассмотрим вопрос о том, какова цена результатов, полученных на основе использования идеи приближенного вторичного квантования, с точки зрения формальной теории возмущений, т. е. разложения по степеням параметра ν , определяющего интенсивность этого взаимодействия частиц. При этом, преследуя исключительно методическую сторону вопроса, мы не будем громоздить члены этого разложения, составляя из них бесконечные суммы и т. д., а воспользуемся весьма наглядным диаграммным их представлением (элементы которого уже были заложены в гл. 1, § 3 в п. и), н), ж)), используя его исключительно в иллюстративных целях, не создавая «словаря диаграмм», переводящего картинку в интегральные выражения, и не занимаясь подсчетом общего числа версий каждой из них (т. е. числа всех различных полных систем спариваний в каждом порядке по ν).

Мы начнем это небольшое исследование с рассмотренной в предыдущем параграфе бозе-системы, так как поставленная выше проблема нами была фактически решена, результат суммирования вкладов от соответствующего методу приближенного

вторичного квантования диаграмм теории возмущений заранее известен, и получать его заново дедовскими методами нет никакой необходимости.

а) Модельный гамильтониан бозе-системы и эквивалентное суммирование ряда теории возмущений

В модельный гамильтониан вырожденной бозе-системы вошли из общей формы для оператора взаимодействия частиц H_1 только четыре характерные конструкции, которые мы, используя опыт гл. 1 (см. § 3, п. и)), изобразим в виде графических элементов, помещенных под каждым из членов этой части гамильтониана,

$$\begin{aligned} (H_1)_{\text{мод}} &= \\ &= \sum_p \left\{ \frac{\nu(p)}{2V} a_0^+ a_0^+ a_p a_{-p} + \frac{\nu(p)}{2V} a_p^+ a_{-p}^+ a_0 a_0 + \frac{\nu(p)}{2V} a_0^+ a_p^+ a_0 a_p + \frac{\nu(p)}{2V} a_p^+ a_0^+ a_p a_0 \right\} = \\ &= \sum_p \left\{ \begin{array}{c} \text{---} p \text{---} \\ | \\ \text{---} -p \text{---} \\ | \\ \text{---} -p \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} p \text{---} \\ | \\ \text{---} -p \text{---} \\ | \\ \text{---} p \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} p \text{---} \\ | \\ \text{---} -p \text{---} \\ | \\ \text{---} p \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} p \text{---} \\ | \\ \text{---} p \text{---} \\ | \\ \text{---} -p \text{---} \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Соединяя всеми возможными способами верхние и нижние вершины линий взаимодействия $\nu(p)/(2V)$ линиями спариваний $\overline{a_p a_{p'}}^+ = \Delta(p - p')$, получаем диаграммное представление вкладов в энергию основного состояния системы

$$\mathcal{E}_0 = N \frac{n\nu(0)}{2} + \begin{array}{c} p \\ | \\ p \\ | \\ -p \end{array} + \begin{array}{c} p \\ | \\ p \\ | \\ -p \end{array} + \dots,$$

в котором каждая вертикальная пунктирная линия («энергетический разрез») определяет структуру соответствующего ее расположению энергетического знаменателя: во 2-м порядке — это $E_p + E_{-p} = 2E_p$ — интегрируемая по модулю p особенность, определяющая величину $\mathcal{E}_0^{(2)}$, в 3-м порядке — это $(2E_p)^2 \sim p^4$ — неинтегрируемая особенность, приводящая к расходимости этого члена разложения (см. § 2, п. а)), в 4-м порядке таким же образом появится «опасный» знаменатель $(2E_p)^3 \sim p^6$ и т. д. Таким образом, весь ряд формальной теории возмущений для энергии основного состояния \mathcal{E}_0 представляет собой сумму наиболее расходящихся на нижнем пределе интеграла по модулю p в каждом порядке, начиная с третьего, вкладов от диаграмм, изображающих члены этого разложения (см. рис. 35).

Учет не вошедших в $(H_1)_{\text{мод}}$ частей полного оператора H_1 , в частности членов, содержащих по одному оператору a_0 или a_0^+ (оператор H_1'' , см. п. а) предыдущего параграфа), тоже приведет к появлению опасных знаменателей, но особенности, создаваемые членами $(H_1)_{\text{мод}}$, будут их подавлять, например, в 4-м порядке по ν основная особенность энергетического знаменателя имеет характер $(2E_p)^3 \sim p^6$, а появляющаяся в этом же порядке особенность вклада, рассчитанного с участием члена H_1'' , будет более слабой — только $(2E_p)^2 \sim p^4$ (см. рис. 36).

В связи с этим становится понятным, что асимптотическое разложение энергии основного состояния неидеального бозе-газа, полученное с помощью использования модельного гамильтониана $(H_1)_{\text{мод}}$ (методом диагонализации, в двухвременном

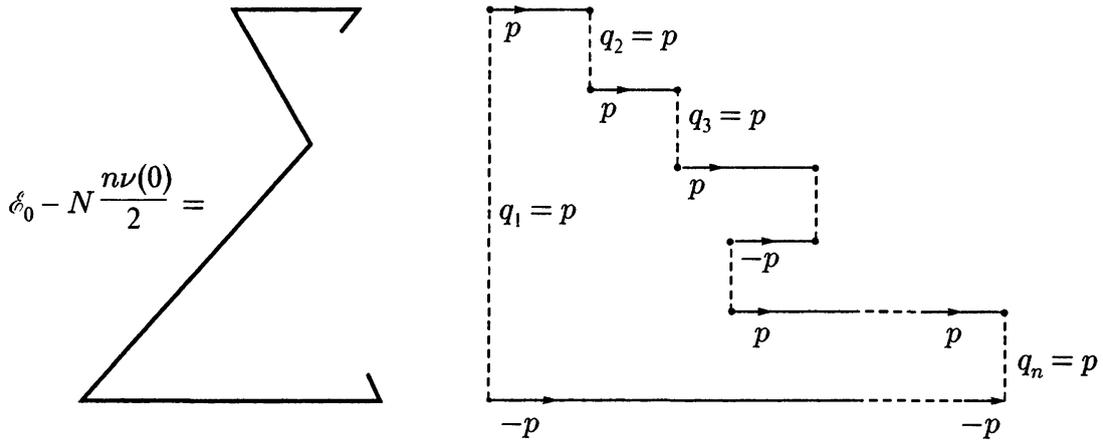


Рис. 35. Условное диаграммное представление энергии основного состояния бозе-системы, определяемой гамильтонианом $H_{\text{мод}}$. Суммирование производится по всем различным относительным расположениям линий взаимодействия и полным системам спариваний, образующим односвязную замкнутую цепь, для каждого порядка, начиная с $n = 2$

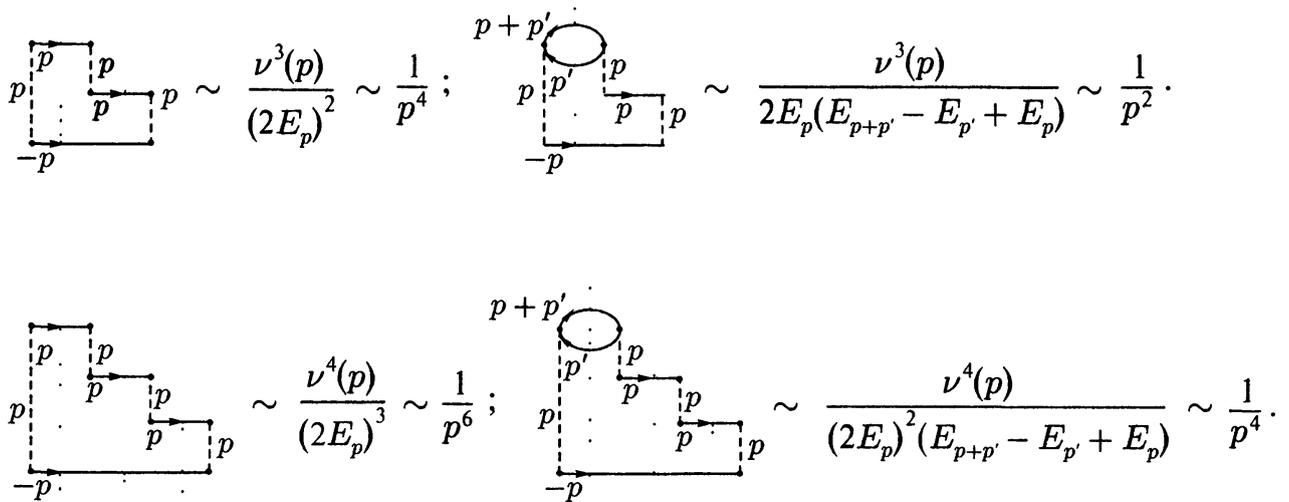


Рис. 36. Сравнение особенностей энергетических знаменателей, соответствующих пунктирным разрезам диаграмм 3-го и 4-го порядков по взаимодействию $\nu(p)$, генерируемых одним оператором $(H_1)_{\text{мод}}$ и оператором H_1'' в сочетании с $(H_1)_{\text{мод}}$

варианте теории или, наконец, с помощью суммирования бесконечной последовательности расходящихся вкладов от генерируемых оператором $(H_1)_{\text{мод}}$ диаграмм), оказывается гарантированным только в порядках ν , ν^2 , $\nu^{5/2}$ и ν^3 (поправки, связанные с учетом зависимости плотности частиц конденсата n_0 от ν , $n_0 = n - \alpha\nu^{3/2}$, скажутся только в членах, начиная с $\nu^{7/2}$).

б) Неидеальный ферми-газ и возможности метода приближенного вторичного квантования

В отличие от бозе-случая в ферми-системе никакой конденсации нет, в изображении членов гамильтониана H_1 никаких «мертвых» линий нет, и теорема о спариваниях работает по отношению ко всем без исключения операторам рождения и уничтожения:

$$\overline{a_p a_{p'}}^+ = \langle a_p a_{p'}^+ \rangle = \Delta(p - p')(1 - n_p); \quad \overline{a_p^+ a_{p'}} = \langle a_p^+ a_{p'} \rangle = \Delta(p - p')n_p,$$

где, вспоминая из теории идеального ферми-газа (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. в)), что в вырожденном случае $n_p = 1$ только при $p < p_F$, спариванию $\overline{a_p^+ a_p} = n_p$ сопоставляется линия «дырки» (как бы назад), а спариванию $\overline{a_p a_p^+} = (1 - n_p)$, которое равно единице только при $p > p_F$ (над сферой Ферми), — линия частицы (стрелка вперед).

Как и в теории неидеальных классических систем (см. т. 2, гл. 3), при рассмотрении вырожденной неидеальной ферми-системы имеется два в определенном смысле противоположных случая, когда приближенное ее рассмотрение имеет конкретное физическое обоснование.

1. Системы частиц с кулоновским взаимодействием

Система с кулоновским взаимодействием частиц друг с другом является наиболее убедительным примером реально существующей системы с дальним действием, когда среднее расстояние между частицами $a = \sqrt[3]{V/N}$ много меньше радиуса их взаимодействия R_0 . Так как для кулоновского потенциала $R_0 = \infty$, то этот критерий для модели электрически нейтральной плазмы (электронного газа в металлах или невырожденной классической плазмы) модифицируется в условие малости величины a по сравнению с радиусом экранировки кулоновского взаимодействия $1/\kappa$ (томас-фермиевского $r_{TF} = 1/\kappa_{TF} = \sqrt{\epsilon_F a^3 / (6\pi e^2)}$ или дебаевского $r_D = 1/\kappa_D = \sqrt{\theta a^3 / (4\pi e^2)}$), что в свою очередь эквивалентно требованию малой величины средней энергии электростатического взаимодействия частиц e^2/a по сравнению со средней величиной их кинетической энергии $\overline{p^2}/(2m)$ (как в случае $\theta \ll \epsilon_F$, так и в невырожденном случае $\theta \gg \epsilon_F$),

$$a \ll \frac{1}{\kappa} \mapsto \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{3}{5} \epsilon_F \gg \frac{18}{5} \pi \frac{e^2}{a}; \quad \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{3}{2} \theta \gg 6\pi \frac{e^2}{a}.$$

Существенным моментом при рассмотрении систем с дальнедействующими силами взаимодействия является сосредоточенность фурье-образа $\nu(q)$ потенциала взаимодействия частиц в области малых (по сравнению с \hbar/R_0) значений импульса q , который для кулоновского потенциала $\Phi(R) = e^2/R$ имеет явно выраженную особенность при $q \rightarrow 0$,

$$\nu(R) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2}$$

(напомним, см. гл. 1, § 3 п. п), что слагаемое, содержащее $\nu(0)$ в гамильтониане такой системы, полностью скомпенсировано наличием положительно заряженного фона, создаваемого ионами решетки). В связи с таким поведением функции $\nu(q)$ при $q \rightarrow 0$ уже во втором порядке теории возмущений будет присутствовать вклад от такой системы спариваний, которая приводит к образованию под знаком суммы по модулю q множителей $\nu^2(q)$, т. е. к неинтегрируемой на нижнем пределе по q особенности

$$\frac{1}{V} \sum_q \nu^2(q) \dots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \left(\frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \right)^2 \dots 4\pi q^2 dq \sim \int_0^\infty \frac{dq}{q^2} = \infty.$$

В следующих, n -х членах разложения по степеням ν порядок этой особенности в части слагаемых, сохраняющих одно и то же значение q , будет все время нарастать как $1/q^{2n-2}$.

Таким образом, во всем разложении теории возмущений выделяется главная последовательность наиболее расходящихся в каждом порядке членов, суммирование которых и приводит к появлению неаналитической по константе взаимодействия $g = e^2$ зависимости (более сильной, чем g^2 , но более слабой, чем g^1) энергии основного состояния или ее внутренней энергии (рассматривая классическую плазму в т. 2, мы получили, что подобный учет дает вклад, пропорциональный $g^{3/2} = e^3$). Конечно, учет указанных членов вовсе не означает, что в разложении теории возмущений не останется никаких расходимостей. Так, в третьем порядке помимо «главных» членов, содержащих $1/q^4$, появятся в подынтегральном выражении по q «менее расходящиеся» конструкции, пропорциональные $1/q^2$, учет которых совместно с аналогичными менее расходящимися вкладами высших порядков приведет к поправкам, хотя и более сильным, чем g^3 , но более слабым по константе g , чем результаты суммирования главной последовательности членов теории возмущений.

Однако процедуру суммирования этой главной последовательности можно заменить точно решаемой задачей для системы, задаваемой соответствующим образом составленным модельным гамильтонианом.

Прежде всего, обратим внимание на то, что максимальная степень $\nu(q)$ с одинаковым аргументом q генерируется при расчете средних $\langle (H_1)^n \rangle_0$ теми системами спариваний операторов рождения и уничтожения, в которых составляющие гамильтониан H_1 комплексы операторов $a_{p+q}^+ a_p$ (являющиеся также основными элементами операторов ρ_q), выходящие из одной из вершин линии взаимодействия $\nu(q)/(2V)$ (см. гл. 1, § 3, п. и)), не разрушаясь, входят в результате спариваний в одну и ту же вершину другой линии взаимодействия $\nu(q')/(2V)$, обеспечивая в ней переносимое такой системой спариваний постоянное значение импульса передачи $q' = q$. Суммирование вкладов, входящих в средние значения разных порядков с общим значением импульса q во всех системах спариваний, достаточно наглядно изображается в виде диаграмм, элементы которых нам знакомы по гл. 1 (см. § 2, п. ж) и § 3, п. н)).

Например, изображенная на рис. 37 а сумма последовательности сохраняющих общее значение q вкладов естественным образом интерпретируется как введение эффективного взаимодействия между частицами системы, а эквивалентное этой сумме интегральное уравнение (рис. 37 б) имеет благодаря сквозному сохранению величины q достаточно простой алгебраический вид (чтобы не писать дважды одни и те же выражения, связанные с присоединением комплекса линий $(p + q, p)$ к верхнему и нижнему концам линии взаимодействия $\nu(q)/(2V)$, мы убрали в ней двойку в знаменателе)

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\nu}(q)}{V} &= \frac{\nu(q)}{V} + \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \left(\frac{n_p(1 - n_{p+q})}{E_{p+q} - E_p} + \frac{n_{p+q}(1 - n_p)}{E_p - E_{p+q}} \right) \frac{\tilde{\nu}(q)}{V} = \\ &= \frac{\nu(q)}{V} + \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E_{p+q} - E_p} \frac{\tilde{\nu}(q)}{V}, \end{aligned}$$

решение которого

$$\tilde{\nu}(q) = \frac{\nu(q)}{1 - \Pi(q, 0)},$$

где

$$\Pi(q, 0) = \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E_{p+q} - E_p} \quad \text{и} \quad \epsilon(q, 0) = 1 - \Pi(q, 0)$$

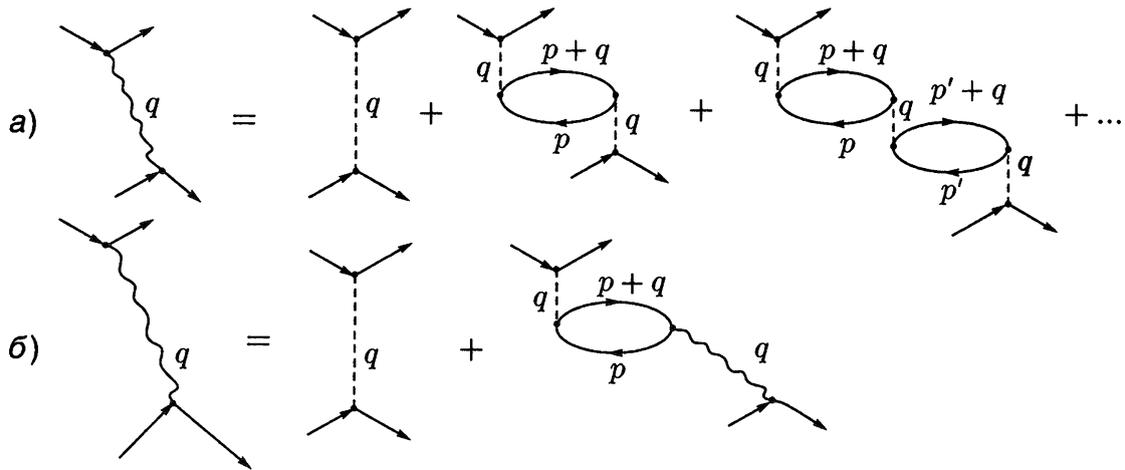


Рис. 37. Диаграммное представление фурье-образа $\tilde{v}(q)$ эффективного потенциала взаимодействия в системе заряженных ферми-частиц в виде ряда наиболее расходящихся при суммировании по q вкладов в каждом порядке теории возмущений (а) и эквивалентное этой сумме интегральное уравнение для $\tilde{v}(q)$ (б)

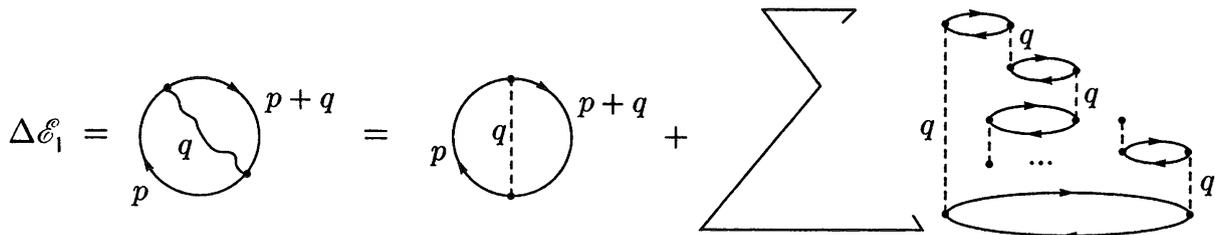


Рис. 38. Энергия $\Delta \mathcal{E}_1 = \langle H_1 \rangle$ системы частиц с кулоновским взаимодействием в «главном» приближении, учитывающем самые расходящиеся вклады в каждом порядке теории возмущений, начиная с $n = 2$. Первый порядок (так называемая обменная энергия $\langle H_1 \rangle_0$) не расходится. Суммирование производится по всем различным расположениям линий взаимодействия

— так называемый поляризационный оператор $\Pi(q, \Omega)$ и динамическая диэлектрическая проницаемость $\epsilon(q, \Omega)$ в статическом приближении $\Omega = 0$, полностью соответствует власовскому приближению, полученному в гл. 3, § 3, п. в), и диэлектрической проницаемости, рассчитанной нами в гл. 3, § 6, п. а).

Энергия взаимодействия частиц системы $\Delta \mathcal{E}_1 = \langle H_1 \rangle$ в этом же приближении изобразится вкладом от диаграммы «первого» порядка по эффективному взаимодействию $\tilde{v}(q)$, которая представлена на рис. 38.

Чтобы не ограничиваться общими декларациями и наглядными картинками, реализуем на практике программу построения гамильтониана модельной системы, точное решение которой учитывает вклады от всех наиболее сильно расходящихся диаграмм отмеченной нами главной последовательности членов ряда теории возмущений.

Осознав важность для данного приближения неразрушаемости комплекса операторов $a_{p+q}^+ a_p$, запишем гамильтониан взаимодействия частиц в виде

$$H_1 = \frac{1}{2V} \sum_p \nu(q) \sum_{pp'} a_{p+q}^+ a_p a_{p'-q}^+ a_{p'} - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q),$$

не смущаясь тем, что последнее слагаемое расходится на верхнем пределе интегрирования по модулю q , так как, как мы покажем несколько позже, точно такая же, но с другим знаком расходимость содержится в первом слагаемом оператора H_1 .

Ориентируясь в основном на вырожденный случай и учитывая, что линии спариваний неразрушаемого «частично-дырочного» комплекса

$$a_{p+q}^+ a_p, \quad |\mathbf{p} + \mathbf{q}| \geq p_F, \quad |\mathbf{p}| \leq p_F,$$

выходящие из вершин линии взаимодействия $\nu(\mathbf{q})/(2V)$, не должны «расходиться» в разные стороны (т. е. обе вправо или обе влево), переопределим основное состояние системы невзаимодействующих ферми-частиц, используя аналогию с полевым «вакуумом», положив

$$a_p^+ = \sqrt{1 - n_p} a_p^+ + \sqrt{n_p} b_p,$$

$$a_p = \sqrt{1 - n_p} a_p + \sqrt{n_p} b_p^+,$$

где первые слагаемые, $\sqrt{1 - n_p} a_p^+$ и $\sqrt{1 - n_p} a_p$ означают операторы рождения и уничтожения частиц над сферой Ферми (или образования газа частиц над ней), а вторые, $\sqrt{n_p} b_p$ и $\sqrt{n_p} b_p^+$ — операторы уничтожения и рождения дырок внутри сферы Ферми (или образование газа из дырок), причем, целесообразность именно половинных степеней, регулирующих величину импульса факторов $(1 - n_p)$ и n_p в спариваниях частичных (стрелки линий спариваний слева направо) и дырочных (стрелки справа налево) состояний, будет подтверждена несколько позже.

Основное состояние идеальной системы H_0 , по состояниям которой с привлечением теоремы о спариваниях рассчитываются члены ряда теории возмущений, определится соотношением «ни дырок, ни частиц»,

$$b_p |0\rangle = 0, \quad a_p |0\rangle = 0,$$

а рождению или уничтожению низлежащих «частично-дырочных» возбужденных состояний системы, существенных в вырожденном случае, будут соответствовать следующие операторные и соответственно графические конструкции

$$A_p^{q+} = a_{p+q}^+ b_p^+ \quad \mapsto \quad \begin{array}{c} \nearrow p+q \\ \searrow p \\ \vdots q \end{array},$$

$$A_p^q = b_p a_{p+q} \quad \mapsto \quad \begin{array}{c} \nearrow p+q \\ \searrow p \\ \vdots q \end{array}.$$

Спаривание именно этих «двойных» операторов, как мы уже отмечали, приводило к сохранению единого значения импульса передачи q во всех порядках теории возмущений, в связи с чем эти операторы должны играть основную роль при моделировании оператора взаимодействия частиц $(H_1)_{\text{мод}} = H_1'$. Поэтому из шестнадцати слагаемых, образующихся при подстановке новых, как бы сдвинутых операторов вместо четверки старых, входящих в H_1 , нам будут важны только те четыре из них, в которых присутствует интересующая нас комбинация пар новых операторов типа A (в остальных двенадцати слагаемых операторы a и b не складываются в операторы A),

$$H_1' = -\frac{N}{2V} \sum_q \nu(q) + \frac{1}{2V} \sum_{qp p'} \nu(q) \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ \sqrt{(1 - n_{p+q})n_p n_{p'}(1 - n_{p'+q})} A_p^{q+} A_{p'}^q \left(\begin{array}{c} \\ \\ p'+q \\ \\ \end{array} \right) + \right. \\
& + \sqrt{n_p(1 - n_{p-q})(1 - n_{p'-q})n_{p'}} A_p^{-q} A_{p'}^{-q+} \left(\begin{array}{c} p-q \\ \\ \\ \\ \end{array} \right) + \\
& + \sqrt{(1 - n_{p+q})n_p(1 - n_{p'-q})n_{p'}} A_p^{q+} A_{p'}^{-q+} \left(\begin{array}{c} \\ \\ \\ p'-q \\ \end{array} \right) + \\
& \left. + \sqrt{n_p(1 - n_{p-q})n_{p'}(1 - n_{p'+q})} A_p^{-q} A_{p'}^q \left(\begin{array}{c} p-q \\ \\ p'+q \\ \\ \end{array} \right) \right\}.
\end{aligned}$$

Выделив в гамильтониане взаимодействия частиц квадратичную форму по A_p^q -операторам, обеспечивающую сквозное значение импульса передачи q во всех порядках теории возмущений (т. е. в n -м порядке максимально возможную степень $\nu^n(q) \sim q^{-2n}$), необходимо обеспечить также и появление правильной структуры энергетических знаменателей типа $1/(E_m - E_n)$, генерируемых соответствующим оператору H'_1 гамильтонианом нулевого приближения. Так как комплексу, состоящему из «родившейся» частицы с импульсом $p + q$ и «уничтожившейся» частицы с импульсом p в этом нулевом приближении соответствует энергия $(E_{p+q} - E_p)$, то, переходя к описанию системы в терминах A_p^q -операторов, необходимо смоделировать нулевой гамильтониан в виде

$$H'_0 = \sum_{p q} (E_{p+q} - E_p) A_p^{q+} A_p^q.$$

Используем теперь основную идею метода приближенного вторичного квантования — объявим двойные по исходным ферми-операторам A_p^q -операторы чисто бозевскими, т. е. положим

$$[A_{p'}^q, A_p^{q+}]_- = \Delta(p - p')\Delta(q - q')$$

(опустив в коммутаторе двух пар исходных ферми-операторов члены, не сохраняющие значение импульса q), и во втором слагаемом оператора H'_1 переставим операторы рождения и уничтожения местами, положив

$$A_p^{-q} A_{p'}^{-q+} = A_{p'}^{-q+} A_p^{-q} + \Delta(p - p').$$

Тогда в операторе H'_1 появится дополнительный член первого по $\nu(q)$ порядка, представив который в виде двух слагаемых,

$$\frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p n_p (1 - n_{p+q}) = \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q) - \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p n_p n_{p+q},$$

мы замечаем, что первое из них убирает аналогичный «расходящийся» член в исходном операторе H_1 , а второе представляет собой законный первый порядок по $\nu(q)$ — так называемую обменную энергию (оставшийся оператор H'_1 генерирует расходящиеся вклады, начиная только со второго порядка теории возмущений). В результате мы убеждаемся в рациональном выборе конструкции «частично-дырочных» операторов, включающих помимо двух ферми-операторов дополнительные факторы $\sqrt{1 - n_p}$ и $\sqrt{n_p}$, что приводит в конечном счете к вполне разумной конструкции эквивалентного гамильтониана

$$H_{\text{эКВ}} = H_0 + (H_1)_{\text{эКВ}} = \sum_p E_p n_p - \frac{1}{2V} \sum_{q,p} \nu(q) n_{p+q} n_p + H',$$

где первое слагаемое обеспечивает результаты, соответствующие идеальному ферми-газу, второе представляет нерасходящуюся первую («обменную») поправку по $\nu(q)$ к этим результатам, а третье слагаемое,

$$\begin{aligned} H' = H'_0 + H'_1 = & \sum_{p,q} (E_{p+q} - E_p) A_p^{q+} A_p^q + \\ & + \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_{p,p'} \left\{ 2\sqrt{n_p n_{p'} (1 - n_{p+q})(1 - n_{p'+q})} A_p^{q+} A_{p'}^q + \right. \\ & \left. + \sqrt{n_p n_{p'} (1 - n_{p+q})(1 - n_{p'-q})} (A_p^{q+} A_{p'}^{-q+} + A_{p'}^{-q} A_p^q) \right\}, \end{aligned}$$

является квадратичной по бозе-операторам формой общего вида, которая, будучи точно обработанной в духе гл. 4, § 1, определит особенности системы, связанные с учетом вкладов от всей последовательности, начиная со второго порядка, наиболее расходящихся и характерных для кулоновского взаимодействия членов ряда формальной теории возмущений.

Чтобы воспользоваться результатами диагонализации общей квадратичной формы, представленными в виде системы уравнений (I) и (II) из упомянутого выше раздела, заметим, что использованным там символам p и μ теперь надо сопоставлять двойные комбинации импульсов, в частности $p \mapsto \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$. Тогда будем иметь

$$\begin{aligned} A(p, p') & \mapsto (E_{p+q} - E_p) \Delta(p - p') \Delta(q - q') + \frac{1}{V} \nu(q) \Delta(q - q') \sqrt{n_p n_{p'} (1 - n_{p+q})(1 - n_{p'+q})}, \\ B(p, p') & \mapsto \frac{1}{2V} \nu(q) \Delta(q + q') \sqrt{n_p n_{p'} (1 - n_{p+q})(1 - n_{p'-q})}, \end{aligned}$$

и система однородных относительно коэффициентов u_p^q и v_p^q уравнений (I) и (II) запишется в виде (ради чистоты записи мы опускаем общий для всех слагаемых тоже двойной индекс μ)

$$\mathcal{E} u_p^q = (E_{p+q} - E_p) u_p^q + \sqrt{n_p (1 - n_{p+q})} C(q), \quad (I')$$

$$-\mathcal{E}v_p^q = (E_{p+q} - E_p)v_p^q + \sqrt{n_p(1 - n_{p+q})} C(-q), \quad (\text{II}')$$

где

$$C(q) = \frac{1}{V} \nu(q) \sum_{p'} \left(\sqrt{n_{p'}(1 - n_{p'+q})} u_{p'}^q + \sqrt{n_{p'}(1 - n_{p'-q})} v_{p'}^{-q} \right).$$

Таким образом, вместо коэффициентов u_p^q и v_p^q можно рассматривать одну неизвестную функцию, так как согласно (I') и (II')

$$u_p^q = \sqrt{n_p(1 - n_{p+q})} \frac{1}{\mathcal{E} - (E_{p+q} - E_p)} C(q),$$

$$v_p^q = -\sqrt{n_p(1 - n_{p+q})} \frac{1}{\mathcal{E} + (E_{p+q} - E_p)} C(-q),$$

причем уравнением для функции $C(q)$, определяющим ее нетривиальное решение, будет служить условие каноничности преобразования (Υ)

$$\sum_{pq} ((u_p^q)^2 - (v_p^q)^2) = 1. \quad (\Upsilon')$$

Подставив выражения для u_p^q и v_p^q в определение функции $C(q)$, получим однородное уравнение

$$C(q) = \frac{1}{V} \nu(q) \sum_{p'} \left[n_{p'}(1 - n_{p'+q}) \frac{C(q)}{\mathcal{E} - (E_{p'+q} - E_{p'})} - n_{p'}(1 - n_{p'-q}) \frac{C(q)}{\mathcal{E} + (E_{p'-q} - E_{p'})} \right],$$

в котором квадратичные по числам заполнения члены взаимно уничтожаются,

$$\sum_{p'} \left[-n_{p'} n_{p'+q} \frac{1}{\mathcal{E} - (E_{p'+q} - E_{p'})} + n_{p'} n_{p'-q} \frac{1}{\mathcal{E} - (E_{p'} - E_{p'-q})} \right] = 0,$$

в чем легко убедиться, произведя во втором слагаемом замену $p' \rightarrow p' + q$. Если в оставшейся сумме заменить во втором слагаемом $p' \rightarrow -p'$ и учесть четность функций E_p и n_p , то, опустив штрих у переменной суммирования и сократив на $C(q)$ (в силу уравнения (Υ') величина $C(q)$ не может равняться нулю), получаем уравнение для допустимых значений энергии \mathcal{E}

$$1 = \frac{1}{V} \nu(q) \sum_p n_p \left(\frac{1}{\mathcal{E} - (E_{p+q} - E_p)} - \frac{1}{\mathcal{E} + (E_{p+q} - E_p)} \right),$$

полностью совпадающее с исследованным нами уравнением власовского приближения (см. гл. 3, § 3, п. в) и гл. 3, § 6 п. а)).

Взяв в качестве примера систему с кулоновским взаимодействием частиц, мы продемонстрировали возможности метода приближенного вторичного квантования в достижении на основе достаточно наглядных физических соображений результатов, эквивалентных получаемым другими (так сказать, «нормальными», т. е. не изменяющими структуры исходных ферми-операторов) методами (см. гл. 3 и гл. 5), использующими подчас более формальный учет особенностей рассматриваемой системы. Не повторяя проведенных в гл. 3 дальнейших исследований полученного выше уравнения, соответствующего условию обращения в ноль динамической диэлектрической проницаемости $\epsilon(q, \mathcal{E}) = 0$, заметим только, что стоящая в правой части этого

уравнения сумма в случае $\theta = 0$ вычисляется точно, однако мы не будем приводить этого расчета и получающегося весьма громоздкого результата, так как его все равно пришлось бы дорабатывать по степеням q^2 , а случай малых значений q , представляющий наиболее интересный результат этого исследования, рассматривается непосредственно и не требует особых математических ухищрений.

2. Ферми-система частиц с короткодействием

Трудно себе представить реально существующую вырожденную систему незаряженных ферми-частиц низкой плотности, когда радиус взаимодействия частиц друг с другом $R_0 \ll \sqrt{V/N}$. В классическом случае (см. т. 2, гл. 3, § 1, п. г)) это приближение приводит к вириальному разложению и имеет вполне реальный физический смысл, в квантовом — это скорее всего методический пример решения задачи, альтернативной рассмотренной в предыдущем пункте.

Низкая плотность для вырожденного ферми-газа — это приближение малых значений радиуса сферы Ферми $p_F = \hbar(3\pi^2 N/V)^{1/3}$ (или, что то же, малых значений температуры вырождения $\theta_0 \cong \varepsilon_F = p_F^2/(2m)$), а это означает, что спаривание ферми-операторов $\overline{a_p^+ a_p} = n_p$, соответствующее линии «дырки», ограничивает область интегрирования по модулю p малым интервалом $0 < p < p_F$ (трехмерная область интегрирования, имеющая размер $\frac{4}{3}\pi p_F^3$, прибавляет целую степень плотности числа частиц N/V к рассчитываемым величинам), в то время как спаривание $\overline{a_p^+ a_p^+} = 1 - n_p$, соответствующее линии частицы, позволяет интегрировать по области $p_F < p < \infty$. Таким образом, с точки зрения формальной теории возмущений, главными членами в низкоплотностном разложении по степеням ν окажутся те из них, в которых будет максимальное число линий частиц (спариваний «вперед») и в связи с этим максимальное число различающихся значений импульсов передачи q (в противоположность случаю системы с кулоновским дальнодействием — приближению одного общего значения q).

Вместо суммирования этих «главных» в данном приближении (называемом не без основания газовым) членов теории возмущений, можно воспользоваться процедурой приближенного вторичного квантования. Введем операторы

$$A_{p+q, p'-q}^+ = a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ \quad \text{и} \quad A_{p', p} = a_{p'} a_p.$$

Тогда оператор взаимодействия частиц H_1 запишется в виде квадратичной формы

$$H_1 = \sum_{qp p'} \frac{\nu(q)}{2V} A_{p+q, p'-q}^+ A_{p', p} \quad \mapsto \quad \begin{array}{c} \xrightarrow{p} \quad \xrightarrow{p+q} \\ \quad \quad \quad \downarrow q \\ \xrightarrow{p'} \quad \xrightarrow{p'-q} \end{array} \quad \mapsto \quad \begin{array}{c} \xrightarrow{p+q} \\ \quad \quad \quad \downarrow q \\ \xrightarrow{p'} \quad \xrightarrow{p'-q} \end{array}.$$

Объявляя в соответствии с процедурой приближенного вторичного квантования новые операторы чисто бозевскими и моделируя нулевой гамильтониан, обеспечивающий появление правильных энергетических знаменателей, приходим к модельной системе с квадратичным по бозе-операторам гамильтонианом

$$H_{\text{мод}} = (H_0)_{\text{мод}} + (H_1)_{\text{мод}} = \sum_{pp'} (E_p + E_{p'}) A_{p,p'}^+ A_{p,p'} + \sum_{qp p'} \frac{\nu(q)}{2V} A_{p+q, p'-q}^+ A_{p', p},$$

допускающим точное решение методами, представленными в § 1 этой главы.

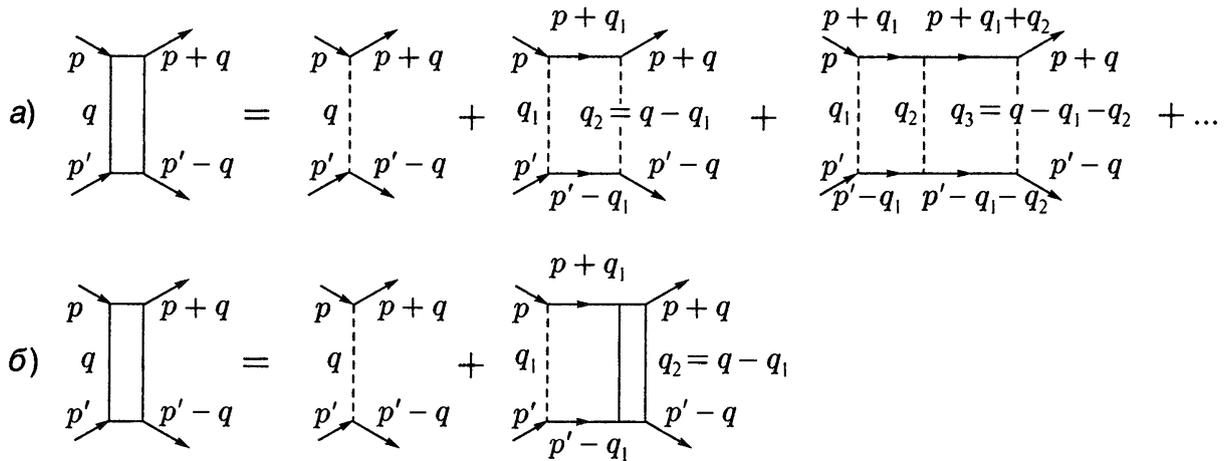


Рис. 39. Диаграммное представление фурье-образа $\tilde{v}(q)$ эффективного потенциала взаимодействия нейтральных частиц ферми-системы низкой плотности (газовое приближение) (а), и эквивалентное суммированию этих лестничных диаграмм интегральное уравнение для t -матрицы рассеяния (б)

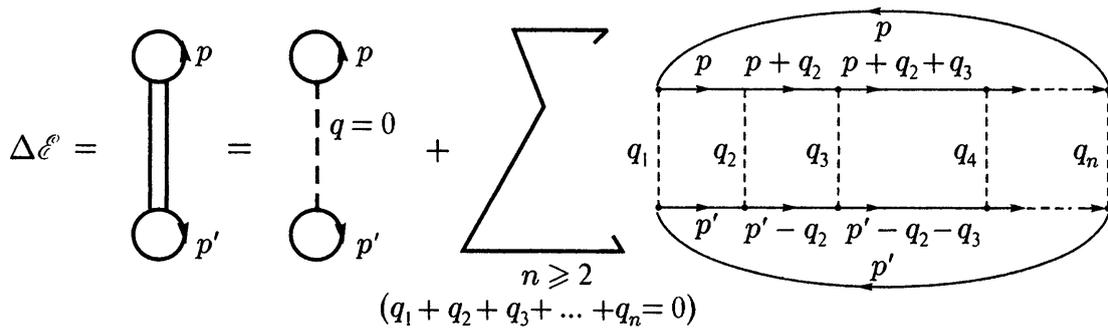


Рис. 40. Энергия $\Delta \mathcal{E} = \langle H_1 \rangle$ системы нейтральных ферми-частиц в низкоплотном (газовом) приближении

С точки зрения теории возмущений, это точное решение эквивалентно суммированию вкладов от диаграмм, генерируемых оператором $(H_1)_{\text{мод}}$, который в каждом порядке сохраняет неразрушающийся «частично-частичный» комплекс исходных ферми-операторов, что и составляет основу «газового» приближения в теории неидеальных ферми-систем. Суммирование характерных для этого приближения лестничных диаграмм, изображенных на рис. 39, эквивалентно введению эффективного взаимодействия между частицами, в интегральном уравнении для которого (см. рис. 39 б) невозможно не узнать уравнение для квантово-механической t -матрицы рассеяния (при уменьшении плотности числа частиц $N/V \rightarrow 0$, т. е. $p_F \rightarrow 0$, это уравнение совпадает с уравнением для t -матрицы в квантово-механической задаче рассеяния двух частиц друг на друге, см. гл. 1, § 3, п. п)), решение которого в случае малых значений q в приближении длины рассеяния имеет вид

$$\tilde{v}(q) = t(q) = \frac{2\pi a \hbar^2}{m}.$$

Энергия системы $\Delta \mathcal{E} = \langle H_1 \rangle$ в этом низкоплотном газовом приближении максимального числа несовпадающих аргументов q_1, q_2, \dots, q_n изобразится вкладом от диаграммы «первого» порядка по эффективному t -матричному приближению теории рассеяния, которая представлена на рис. 40.

Скажем несколько подытоживающих слов в заключение этого параграфа.

Метод приближенного вторичного квантования физически нагляден, улавливает основные кинематические и динамические особенности исследуемой системы, экви-

валентен проведению частичных суммирований основных членов ряда формальной теории возмущений по параметру взаимодействия ν и обманчиво прост.

Однако это нерегулярный метод. Сохранить его идеологию при расчете поправок к полученным этим методом результатам (для поднятия их престижа часто называемых «главным» приближением) невозможно, так как эта процедура связана с неизбежным разрушением тех комплексов из исходных операторов (состоящих из двух бозевских или двух фермиевских первоначальных операторов), которые объявлялись чисто бозевскими и на базе которых производилась диагонализация модельного гамильтониана.

Если же это главное приближение объявить нулевым приближением супер-теории возмущений, то не совсем ясно, как с помощью этих приближенно бозевских операторов гарантированно сформировать из неучтенных членов первоначальной теории возмущений дополнительную часть общего гамильтониана \tilde{H}_1 , которая возмущает приведенную к диагональному виду систему.

§ 4. Метод приближенного вторичного квантования в теории ферромагнетизма

Физическая природа ферромагнетизма, т. е. возникновения упорядоченного состояния магнитных моментов атомов кристаллической решетки, коллективно создающих внутри твердого тела сильное магнитное поле (называемое молекулярным), первоначально связывалась с взаимодействием магнитных моментов узлов решетки друг с другом. Однако оценка энергии спин-спинового взаимодействия для реальных значений магнетона Бора и расстояния между узлами решетки показала, что ее величина совершенно недостаточна для создания и поддержания упорядоченного состояния магнитных моментов во всем диапазоне температур вплоть до точки Кюри, величина которой для разных ферромагнетиков имеет значения от долей до сотен градусов по шкале Кельвина.

Только после разработки квантовой теории стало понятным, что природа ферромагнитного (а также антиферромагнитного и ему подобных) упорядочения представляет собой исключительно квантово-механический эффект. Чтобы понять, в чем тут дело, рассмотрим этот вопрос, исходя из самых начальных квантово-механических представлений.

а) Гейзенберговская модель ферромагнетика

Обратимся к квантово-механической архаике — проблеме основного состояния молекулы водорода в первом порядке стационарной теории возмущений. Если состояния изолированных атомов водорода, около ядер которых α и β находятся электроны 1 и 2 в s -состояниях, характеризуются волновыми функциями $\Psi_\alpha(1)u(1)$ и $\Psi_\beta(2)u(2)$, где Ψ_α и Ψ_β — координатные части водородоподобной функции s -состояния, а $u(1)$ и $u(2)$ — спиновые ее части, то волновые функции нулевого приближения двухэлектронной системы, каковой является молекула водорода, удовлетворяющие непреложному принципу антисимметрии, возможны в двух вариантах:

$$\Psi_{\uparrow\downarrow} = S_{12}(\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2)) \cdot A s_{12}(u(1)u(2)) \quad s = 0, \quad s_z = 0 \text{ — синглет,}$$

$$\Psi_{\uparrow\uparrow} = A s_{12}(\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2)) \cdot S_{12}(u(1)u(2)) \quad s = 1, \quad s_z = (-1, 0, 1) \text{ — триплет,}$$

где S_{12} и $A s_{12}$ — операторы симметризации и антисимметризации по индексам 1 и 2. Энергия основного состояния такой молекулы водорода при учете только

кулоновского взаимодействия электронов $U_{\alpha\beta}(1, 2)$ в первом порядке стационарной теории возмущений будет равна

$$E_1 = \int \Psi_{\uparrow\downarrow}^* U_{\alpha\beta}(1, 2) \Psi_{\uparrow\downarrow} dx_1 dx_2 = 2E_0 + K + I,$$

$$E_3 = \int \Psi_{\uparrow\uparrow}^* U_{\alpha\beta}(1, 2) \Psi_{\uparrow\uparrow} dx_1 dx_2 = 2E_0 + K - I,$$

где E_0 — энергия s -состояния изолированного атома водорода, K — средняя энергия кулоновского взаимодействия электронов,

$$K = \int |\Psi_\alpha(1)|^2 U_{\alpha\beta}(1, 2) |\Psi_\beta(2)|^2 dr_1 dr_2,$$

I — так называемая обменная энергия,

$$I = \int \Psi_\alpha^*(1) \Psi_\beta^*(2) U_{\alpha\beta}(1, 2) \Psi_\alpha(2) \Psi_\beta(1) dr_1 dr_2,$$

не имеющая какого-либо классического аналога. Этот результат для энергий синглетного и триплетного состояний молекулы водорода можно представить в иной форме, используя паулиевские двухрядные матрицы σ_1 и σ_2 , характеризующие спиновые состояния электронов 1 и 2. Учитывая связь величины $\sigma = \sigma_1 + \sigma_2$ с механическим моментом системы, имеем очевидные соотношения

$$\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + 2(\sigma_1 \sigma_2) = 6 + 2(\sigma_1 \sigma_2), \quad \frac{\hbar^2}{4} \sigma^2 = \hbar^2 s(s + 1),$$

откуда следует, что

$$(\sigma_1 \sigma_2) = 2s(s + 1) = \begin{cases} -3 & \text{в случае синглетного состояния,} \\ +1 & \text{в случае триплетного состояния,} \end{cases}$$

или в более компактной форме,

$$\frac{(\sigma_1 \sigma_2) + 1}{2} = \begin{cases} -1 & \text{в случае синглета } s = 0, \\ +1 & \text{в случае триплета } s = 1 \end{cases}$$

(так называемый дираковский оператор обмена спинами). Поэтому энергию основного состояния молекулы водорода, принимающую значения E_1 и E_3 , можно записать в виде одной формулы,

$$E = 2E_0 + K - I \frac{(\sigma_1 \sigma_2) + 1}{2} = \text{const} - \frac{1}{2} I (\sigma_1 \sigma_2).$$

Итак, если обменный интеграл $I > 0$, то триплетное состояние $\Psi_{\uparrow\uparrow}$ с параллельным расположением спинов s -электронов является преимущественным. В этой двухатомной системе это, конечно, только зачаток ферромагнетизма.

Теперь представим себе систему из неподвижных N узлов с s -электронами на их орбитах. В отсутствии орбитального движения электронов магнитные моменты узлов будут определяться спинами этих электронов, $\mu = \beta \sigma$, где $\beta = e\hbar/(2mc)$ — магнетон Бора. Тенденция к их упорядочению по направлению будет определяться не спин-спиновым взаимодействием (в которое, кстати, тоже входит скалярное произведение $(\sigma_i \sigma_j)$), а тем, насколько волновая функция s -состояния электрона какого-либо из узлов этой решетки перекрывается с подобными же функциями соседних с ним узлов. Конечно, рассмотрение N -частичной системы технически сложнее,

чем двухатомной проблемы молекулы водорода, но физическая причина, побуждающая магнитные моменты узлов к их упорядочению, остается той же — перекрытие волновых функций электронов из соседних узлов, т. е. обменное взаимодействие.

Обозначая координаты узлов \mathbf{r}_{f_i} , где f_i — номер узла решетки ($i = 1, 2, \dots, N$), просто одним нижним индексом f и расстояние между узлами $|\mathbf{r}_{f_1} - \mathbf{r}_{f_2}|$ как $(f_1 - f_2)$, приходим к так называемой модели Гейзенберга ферромагнитной системы:

$$\mathcal{H} = \text{const} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{f_1 f_2 \\ (f_1 \neq f_2)}} J(f_1 - f_2) (\sigma_{f_1} \sigma_{f_2})$$

(В. Гейзенберг — 1927 г., П. Дирак — 1929 г., Дж. Ван Флек — 1932 г.). Сразу отметим, что в этой двойной сумме по f_1 и f_2 содержится $N(N - 1)$ слагаемых, но так как обменный интеграл очень быстро убывает с ростом расстояния между узлами $(f_1 - f_2)$ и отличен от нуля в основном только для ближайших соседей-узлов, число которых варьируется от шести (кубическая решетка) до двенадцати (гексагональная упаковка и гранцентрированная кубическая решетка) (следующие координационные сферы вносят лишь малые поправки), то число слагаемых сокращается до величины cN , где c — число ближайших соседей у каждого из узлов, что и обеспечивает правильный общий статистический порядок гамильтониана $\mathcal{H} \sim N$.

В пользу предложенной структуры гамильтониана имеются и чисто формальные соображения, не вскрывающие, правда, природы обменного взаимодействия. Действительно, если в каждом узле решетки находится по одному связанному электрону, то числа заполнения в каждом узле удовлетворяют соотношению

$$N_f \left(\frac{1}{2} \right) + N_f \left(-\frac{1}{2} \right) = 1.$$

Магнитный момент узла решетки за счет этого связанного электрона будет определяться разностью чисел заполнения

$$N_f \left(\frac{1}{2} \right) - N_f \left(-\frac{1}{2} \right) = \sigma_f^z = \pm 1,$$

т. е. z -компонентой матрицы Паули. Таким образом, мы получаем, что

$$N_f \left(\pm \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} (1 \pm \sigma_f^z),$$

и амплитуда состояния этой системы N связанных с узлами решетки электронов, определяемая набором чисел заполнения N_f , будет выражаться через паулиевские матрицы σ_f^z ,

$$\Phi \left(\dots, N_f \left(\frac{1}{2} \right), N_f \left(-\frac{1}{2} \right), \dots \right) = \Phi \left(\dots, \sigma_f^z, \dots \right).$$

Поэтому и операторы динамических величин можно представить не как комбинации операторов a_f^+ и a_f , действующих на числа N_f , а как спиновые операторы Паули

$$\sigma_f = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad \text{и} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

действующие на σ_f^z . Если представить гамильтониан такой системы в виде «разложения»

$$\mathcal{H} = h_0 + \sum_f \mathbf{h}_f \boldsymbol{\sigma}_f + \frac{1}{2} \sum_{f_1 \neq f_2} \sum_{\alpha\beta} h^{\alpha\beta}(f_1, f_2) (\sigma_{f_1}^\alpha \sigma_{f_2}^\beta) + \dots,$$

то, учитывая его самосопряженность, $\mathcal{H}^+ = \mathcal{H}$ (вследствие которой все величины h оказываются действительными), отсутствие выделенного направления, т. е. магнитного поля (вследствие чего $\mathbf{h} = 0$) и инвариантность системы относительно пространственных поворотов, мы неизбежно приходим к гейзенберговской структуре гамильтониана

$$\mathcal{H} = h_0 + \frac{1}{2} \sum_{f_1 \neq f_2} h(f_1, f_2) (\boldsymbol{\sigma}_{f_1} \boldsymbol{\sigma}_{f_2}) + \dots$$

Итак, если в системе N узлов взаимодействие спинов связанных с ними s -электронов друг с другом провоцируется обменным интегралом $J(|\mathbf{r}_{f_1} - \mathbf{r}_{f_2}|) = J(f_1 - f_2)$ и эта система помещена во внешнее магнитное поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$, то гамильтониан такой системы будет иметь вид

$$\mathcal{H} = -\beta H \sum_f \sigma_f^z - \frac{1}{2} \sum_{\substack{f_1 f_2 \\ f_1 \neq f_2}} J(f_1 - f_2) (\boldsymbol{\sigma}_{f_1} \boldsymbol{\sigma}_{f_2}).$$

Остановимся на некоторых особенностях этой модели. Прежде всего, в ней не учтено тепловое движение узлов кристаллической решетки — они пространственно закреплены и тем определяют дискретность всей системы. Этот недостаток можно впоследствии смягчить, введя на феноменологическом уровне взаимодействие колебаний решетки (фононов) с магнитными возбужденными состояниями (спиновыми волнами). Далее, система изотропна, однако анизотропию решетки можно учесть, введя вдоль осей x , y и z разные значения обменных интегралов (например, в $(x-y)$ -модели $J_x = J_y \neq J_z$). Наконец, представленная модель — это ферромагнитный (в случае $J > 0$) изолятор, и тут уже ничем помочь нельзя.

В отношении связи гейзенберговской модели с реальными ферромагнетиками сказать что-либо утешительное трудно. В природе нет систем, в которых ферромагнитное упорядочение определялось бы связанными s -электронами. Постоянные магнитные (спиновые, орбитальные или комбинированные) моменты у атомов реальных ферромагнетиков создаются недостроенными внутренними электронными оболочками, в частности, у группы железа недостроены $3d$ -оболочки (так что обменное взаимодействие, ответственное за возникновение спонтанной намагниченности, приобретает гораздо более сложную структуру по сравнению с рассмотренной нами моделью молекулы водорода по Гайтлеру и Лондону), в то время как внешние электроны, коллективизируясь, образуют электронный газ, обеспечивающий металлические свойства системы.

Однако модель Гейзенберга обладает ферромагнетизмом вплоть до точки фазового перехода в парамагнитное состояние и, главное, проста и достаточно компактна, что привлекает к ней математиков, не очень заботящихся о ее физической ценности, причем особую популярность приобрела упрощенная безоператорная модель ферромагнетика, предложенная еще в доквантовую эпоху Изингом (1925), отличающаяся от гейзенберговской модели тем, что вместо матриц Паули в ней фигурируют числа $\sigma_f = \pm 1$ (т. е. только σ^z -матрицы). Эта в двух отношениях дискретная модель (в координатном смысле и в числовом), основанная на двоичной системе

(плюс—минус или ноль—единица) фиксации состояния системы, была точно решена в одномерном варианте самим Изингом (см. т. 2) и для квадратной плоской решетки в случае $H = 0$ Л. Онсагером (1944), обнаружившим в ней логарифмическую особенность теплоемкости в точке фазового перехода в неупорядоченное состояние. Увлечение двоичной игрой в крестики-нолики привело к «дискретизации» ряда физических проблем, не имеющих к «решетчатому» ферромагнетизму прямого отношения, а многочисленные попытки приблизиться к точному решению трехмерной задачи хотя и соблазнительны, но, по-видимому, столь же бесперспективны, как и поиск абсолютно безусловного доказательства великой теоремы Ферма.

Прежде чем перейти к исследованию гейзенберговской модели, запишем характеризующий ее гамильтониан с помощью операторов Паули рождения и уничтожения, непосредственно связанных с σ -матрицами (см. гл. 1, § 3, п. ж),

$$\begin{aligned} b_f &= \frac{\sigma_f^x + i\sigma_f^y}{2}, & \sigma_f^x &= b_f^+ + b_f, & [b_f^+, b_{f'}]_- &= 0 \quad \text{в случае } f \neq f', \\ b_f^+ &= \frac{\sigma_f^x - i\sigma_f^y}{2}, & \sigma_f^y &= i(b_f^+ - b_f), & b_f^+ b_f + b_f b_f^+ &= 1, \\ & & \sigma_f^z &= 1 - 2b_f^+ b_f, & b_f b_f &= b_f^+ b_f^+ = 0. \end{aligned}$$

и напомним, что по своей природе это бозевские операторы рождения и уничтожения, действующие в пространстве чисел заполнения $b_f^+ b_f = N_f$, ограниченном значениями $N_f = 0$ и $N_f = 1$.

Обозначим

$$\theta_0 = \sum_f J(f - f_0) = cJ,$$

где c — число ближайших к узлу f_0 соседей (или эквивалентная ему величина, если обменное взаимодействие охватывает узлы решетки, следующие за ближайшими). Тогда гейзенберговский гамильтониан запишется в виде

$$\mathcal{H} = -N \left(\beta H + \frac{1}{2} \theta_0 \right) + (2\beta H + 2\theta_0) \sum_f b_f^+ b_f - 2 \sum_{f \neq f'} J(f - f') (b_f^+ b_{f'} + b_f^+ b_f b_{f'}^+ b_{f'}).$$

б) Возможности теории возмущений

Полагая

$$\mathcal{H}_0 = -\beta H \sum_f \sigma_f^z,$$

имеем в нулевом приближении для основного состояния системы магнитных моментов, помещенных во внешнее магнитное поле, т. е. когда все $\sigma_f^z = 1$, что энергия основного состояния и намагниченность равны

$$\mathcal{E}_0 = -\beta H N, \quad M_0 = \beta N.$$

Для энергии простейшего возбужденного состояния (один из спинов перевернулся) имеем

$$\varepsilon = \mathcal{E}(1, 1, \dots, 1, -1, 1, \dots, 1) - \mathcal{E}_0 = 2\beta H.$$

В нулевом приближении каждый узел кристаллической решетки — это изолированная от других узлов двухуровневая система, поэтому статистическая сумма рассчитывается элементарно,

$$Z_0 = (z_f)^N = \left(\sum_{\sigma=\pm 1} e^{\frac{\beta H}{\theta} \sigma} \right)^N = \left(2 \operatorname{ch} \frac{\beta H}{\theta} \right)^N,$$

откуда для намагничения системы получаем известный результат,

$$M = -\frac{\partial \mathcal{F}_0}{\partial H} = \theta \frac{\partial \ln Z_0}{\partial H} = M_0 \operatorname{th} \frac{\beta H}{\theta},$$

из которого в случае слабых полей $\beta H \ll \theta$ следует для удельной восприимчивости закон Кюри для идеального парамагнетизма,

$$\chi = \frac{1}{M_0} \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} = \frac{\beta}{\theta}.$$

В первом приближении

$$\langle H_1 \rangle = \frac{\operatorname{Sp} \{ H_1 e^{-H_0/\theta} \}}{\operatorname{Sp} e^{-H_0/\theta}} = -\frac{1}{2} \sum_{f_1 \neq f_2} J(f_1 - f_2) \langle \sigma_{f_1} \sigma_{f_2} \rangle.$$

Так как вследствие мультипликативной структуры оператора $e^{-\mathcal{H}_0/\theta}$ среднее значение от произведения спиновых операторов распадается в случае $f_1 \neq f_2$ на произведение средних, каждый из сомножителей которого не зависит от номера узла f , и так как

$$\langle \sigma^x \rangle = \langle \sigma^y \rangle = 0, \quad \langle \sigma^z \rangle = \operatorname{th} \frac{\beta H}{\theta},$$

то, собирая сумму по f_1 и f_2 в константу $N\theta_0$, получаем

$$\langle \mathcal{H}_1 \rangle = -\frac{1}{2} N\theta_0 \operatorname{th}^2 \frac{\beta H}{\theta}.$$

Так как в первом порядке по константе взаимодействия

$$\Delta \mathcal{F} = \int_0^1 dg \langle \mathcal{H}_1 \rangle^{(g)} = \langle \mathcal{H}_1 \rangle,$$

то для намагничения в этом приближении будем иметь

$$M = -\frac{\partial(\mathcal{F}_0 + \Delta \mathcal{F})}{\partial H} = \beta N \operatorname{th} \frac{\beta H}{\theta} + \beta N \operatorname{th} \frac{\beta H}{\theta} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\beta H}{\theta}} \cdot \frac{\theta_0}{\theta}.$$

Если записать этот результат для случая $\beta H/\theta \ll 1$,

$$\frac{M}{M_0} = \frac{\beta H}{\theta} + \frac{\beta H}{\theta} \cdot \frac{\theta_0}{\theta},$$

то станет уже совсем ясно, что мы имеем дело с высокотемпературным разложением по степеням θ_0/θ (т. е. для случая $\theta \gg \theta_0$). Если же вспомнить, что из феноменологической теории молекулярного поля Вейсса (см. т. 2) в парамагнитной области $\theta > \theta_{\text{Кюри}}$ следует, что

$$\frac{M}{M_0} = \frac{\beta H}{\theta - \theta_{\text{Кюри}}},$$

и представить этот закон Кюри—Вейсса в высокотемпературной области $\theta \gg \theta_{\text{Кюри}}$ в виде

$$\frac{M}{M_0} \cong \frac{\beta H}{\theta} + \frac{\beta H}{\theta} \cdot \frac{\theta_{\text{Кюри}}}{\theta},$$

то, сравнивая его с результатом первого приближения по теории возмущений, получим оценку, связывающую температуру Кюри с величиной обменного интеграла

$$\theta_{\text{Кюри}} = cJ = \theta_0.$$

Мы не будем развивать теорию возмущений дальше, так как уже на примере расчета первого порядка по обменному взаимодействию становится ясным, что она обслуживает только область температур выше точки Кюри, т. е. парамагнитное состояние системы, и совершенно бесперспективна в отношении описания ферромагнитного состояния системы в области низких температур.

в) Приближенное вторичное квантование и сведение к точно решаемой модели

В этом пункте удобнее рассматривать гамильтониан гейзенберговской системы, выраженный через операторы Паули b_f и b_f^+ . Наша задача — не теряя, по возможности, физического содержания этого гамильтониана, аппроксимировать его такой формой, которая допускала бы точное решение статистической задачи.

Во-первых, будем рассматривать систему в области $\theta \cong 0$ (т. е. парамагнитная область, столь благополучно исследуемая методами теории возмущений, исключается из рассмотрения сразу).

При $\theta = 0$ будем считать, что система находится в полностью упорядоченном состоянии, все числа заполнения $N_f = 0$ (т. е. все $\sigma_f^z = 1$), а в области низких температур $\theta \gtrsim 0$ перевернувшихся спинов (т. е. чисел $N_f = 1$) относительно мало, более точно, $\langle N_f \rangle = \langle b_f^+ b_f \rangle \ll 1$. В связи с этим опустим в гамильтониане квадратичный по числам заполнения член

$$-2 \sum_{f \neq f'} J(f - f') N_f N_{f'}$$

(сохраняя надежду при желании потом учесть его с помощью теории возмущений). Остается квадратичная форма. Но радоваться пока еще рано, так как квадратичная форма по операторам Паули не диагонализуется с помощью линейного преобразования, так как это преобразование по отношению к ним не является каноническим (каноническим является линейное преобразование операторов σ , т. е. обычный поворот в трехмерном пространстве, но σ^x и σ^y линейны по операторам b^+ и b , в то время как матрица $\sigma^z = 1 - 2b^+ b$ квадратична по операторам Паули).

Во-вторых, если вспомнить, что для операторов Паули имеют место соотношения

$$b_f^+ |N_f\rangle = \sqrt{N_f + 1} |N_f + 1\rangle, \quad b_f |N_f\rangle = \sqrt{N_f} |N_f - 1\rangle$$

такие же, как и для бозе-операторов, но сами числа заполнения N_f ограничены только двумя значениями, $N_f = 0$ или $N_f = 1$, и учесть, что низкотемпературная область $\theta \cong 0$ характеризуется относительно малым числом возбужденных состояний, то, расширив область возможных значений для чисел заполнения, сняв с них паулиевский запрет и разрешив им принимать любые значения, $N_f = 0, 1, 2, \dots$, мы превратим операторы b_f^+ и b_f в обычные бозе-операторы рождения и уничтожения. Оправдать такую аппроксимацию паулиевских операторов бозевскими можно, пожалуй, лишь морально: в случае $\theta \cong 0$ реализуются в основном значения $N_f = 0$, а чисел $N_f = 1$ очень мало ($\langle N_f \rangle \ll 1$), значений же $N_f = 2$, $N_f = 3$ и т. д. будет еще гораздо меньше, но какой именно и в какой мере незначительный вклад вносят эти

нефизические состояния в макроскопические характеристики системы, определить очень трудно, так как изменение кинематики системы — это не динамический эффект, поддающийся оценке методами традиционной теории возмущений. Однако с физической точки зрения операция выглядит достаточно правдоподобно.

Итак, в результате двух аппроксимационных шагов, из которых второй представляет собой приближенное вторичное квантование, отличающееся по физическому смыслу от использованного в предыдущем параграфе приема с тем же названием, мы пришли к модельному гамильтониану, представляющему собой квадратичную форму по бозе-операторам,

$$\widetilde{\mathcal{H}} = -N \left(\beta H + \frac{1}{2} \theta_0 \right) + (2\beta H + 2\theta_0) \sum_f b_f^+ b_f - 2 \sum_{f \neq f'} J(f - f') b_{f'}^+ b_f,$$

т. е. к точно решаемой задаче статистической механики.

Так как этот гамильтониан не включает членов типа $b^+ b^+$, то «перепутывать» операторы рождения и уничтожения нет необходимости. Поэтому, полагая сразу коэффициенты линейного преобразования $v = 0$, имеем в обозначениях § 1 этой главы:

$$A_{ff'} = (2\beta H + 2\theta_0) \Delta(f - f') - 2J(f - f'); \quad B_{ff'} = 0.$$

В связи с этим оставшееся уравнение (I) из системы секулярных уравнений и дополнительные условия (Υ) и (Υ') будут иметь вид:

$$\varepsilon_k u(k, f) = \sum_{f'} A(f, f') u(k, f'),$$

$$\sum_f u^*(k, f) u(k', f) = \Delta(k - k'), \quad \sum_k u^*(k, f) u(k, f') = \Delta(f - f').$$

Так как индекс f соответствует координате \mathbf{r}_f , то решение, удовлетворяющее дополнительным условиям (Υ) и (Υ') усматривается сразу:

$$u(k, f) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikf},$$

и диагонализующее модельный гамильтониан преобразование операторов

$$b_f = \sum_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikf} \xi_k, \quad \xi_k = \sum_f \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-ikf} b_k$$

приобретает вид стандартного фурье-преобразования от координатного \mathbf{r}_f -представления к представлению волнового числа \mathbf{k} . Энергия возбужденных состояний бозевского типа (т. е. собственные значения оператора $\widetilde{\mathcal{H}}$)

$$\varepsilon_k = \sum_{f'} A(f, f') \frac{u(k, f')}{u(k, f)} = 2\beta H + 2\theta_0 - 2 \sum_{f'} J(f - f') e^{ik(f-f')}$$

с учетом определения величины $\theta_0 = \sum_f J(f)$ и сдвига переменной суммирования в сумме по f' приобретает вид

$$\varepsilon_k = 2\beta H + 2 \sum_f (1 - e^{ikf}) J(f),$$

и мы получаем для диагонализированного гамильтониана рассматриваемой бозе-системы выражение

$$\widetilde{\mathcal{H}} = -N \left(\beta H + \frac{1}{2} \theta_0 \right) + \sum_k \left\{ 2\beta H + 2 \sum_f (1 - e^{ikf}) J(f) \right\} \xi_k^+ \xi_k.$$

Эти результаты можно было получить, и не вспоминая материал § 1. Действительно, используя стандартное фурье-преобразование b_f -операторов, имеем для частей модельного гамильтониана:

$$\begin{aligned} \sum_f b_f^+ b_f &= \sum_{kk'} \frac{1}{V} \sum_f e^{ikf - ik'f} \xi_{k'}^+ \xi_k = \sum_{kk'} \Delta(k - k') \xi_{k'}^+ \xi_k = \sum_k \xi_k^+ \xi_k, \\ -2 \sum_{kk'} \sum_{f \neq f'} J(f - f') \frac{1}{V} e^{ikf - ik'f'} \xi_{k'}^+ \xi_k &= -2 \sum_{kk'} \frac{1}{V} \sum_{f'} e^{i(k-k')f'} \sum_{f \neq 0} J(f) e^{ik'f} \xi_{k'}^+ \xi_k = \\ &= -2 \sum_k \sum_f J(f) e^{ikf} \xi_k^+ \xi_k, \end{aligned}$$

что сразу приводит к полученному выше результату для ϵ_k и диагональной форме гамильтониана $\widetilde{\mathcal{H}}$.

Первое слагаемое в $\widetilde{\mathcal{H}}$ представляет энергию основного состояния полностью упорядоченной системы магнитных моментов, состоящую из двух частей: $-N\beta H$ — за счет взаимодействия с внешним магнитным полем H , и $-N \cdot \theta_0/2 = -NcJ/2$ — за счет числа благоприятных для образования ферромагнитного упорядочения взаимодействий узлов с ближайшими к ним соседями. Возбужденное состояние системы имеет явно выраженный коллективный характер: возбуждение фурье-компоненты $\xi_k^+ |0\rangle$ — это с точки зрения исходного координатного представления волна «переворачивающихся» спинов (отсюда и название — спиновая волна), дисперсионная зависимость энергии которой от волнового числа целиком определяется обменным взаимодействием J (второе слагаемое в фигурных скобках). Условие физического оправдания всего подхода к решению этой задачи, $\langle N_f \rangle \ll 1$, теперь выглядит как условие малости плотности числа спиновых волн \widetilde{N} в системе,

$$\langle b_f^+ b_f \rangle = \sum_{kk'} \frac{1}{V} e^{i(k-k')f} \langle \xi_k^+ \xi_{k'} \rangle = \frac{1}{V} \sum_k \langle \xi_k^+ \xi_k \rangle = \frac{\widetilde{N}}{V} \ll 1.$$

г) Термодинамические свойства и намагничение системы в области низких температур

В определении термодинамических свойств системы в области $\theta \cong 0$ основную роль играют низколежащие участки спектра возбужденных состояний ϵ_k , т. е. область малых значений импульса $\hbar k$. Имея дело в модельной постановке с правильной кристаллической решеткой, ограничимся рассмотрением простейшего случая кубической ее структуры (см. рис. 41). Тогда в определяющей энергию ϵ_k сумме по координатам \mathbf{r}_f ближайших к обозначенному индексом $\mathbf{f} = 0$ данному узлу соседей, расположенных от него на расстоянии a (постоянная решетки), слагаемые будут группироваться в пары вдоль каждой из осей $\alpha = (x, y, z)$,

$$1 - e^{ik_\alpha a} + 1 - e^{-ik_\alpha a} = 2(1 - \cos k_\alpha a) \cong k_\alpha^2 a^2 + \dots$$

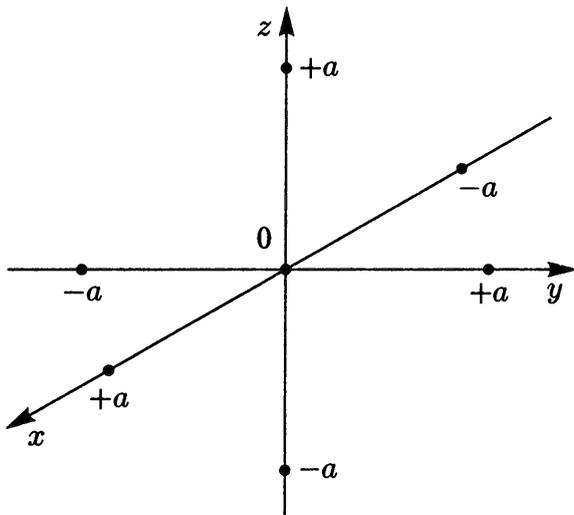


Рис. 41. Расположение ближайших соседей по осям x, y, z в простой кубической решетке

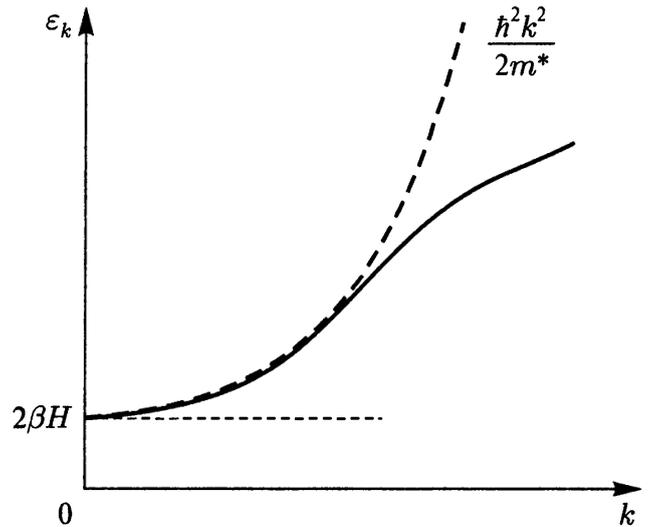


Рис. 42. Зависимость энергии возбужденного состояния гейзенберговского ферромагнетика от волнового числа

Таким образом в низколежащей области $ka \ll 1$ (в области малых значений импульса $\hbar k$) в случае, когда можно ограничиться учетом взаимодействий только ближайших соседей, получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= 2\beta H + 2 \sum_f (1 - e^{ikf}) J(f) \cong 2\beta H + 2J \sum_{\langle f \rangle} (1 - e^{ikf}) \cong \\ &\cong 2\beta H + 2Ja^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = 2\beta H + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2, \end{aligned}$$

где «эффективная масса» возбужденного состояния типа спиновой волны определена как

$$m^* = \frac{\hbar^2}{4Ja^2}.$$

Далее следует уже стандартная программа для идеального бозе-газа:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Sp} e^{-\tilde{\mathcal{H}}/\theta} = \exp \left\{ N \frac{\beta H + \theta_0/2}{\theta} \right\} \text{Sp} \left\{ \exp \left\{ - \sum_k \frac{\varepsilon_k}{\theta} \xi_k^+ \xi_k \right\} \right\} = \\ &= \exp \left\{ N \frac{\beta H + \theta_0/2}{\theta} - \sum_k \ln (1 - e^{-\varepsilon_k/\theta}) \right\} = e^{-\mathcal{F}/\theta}, \end{aligned}$$

и все термодинамические характеристики системы определяются через производные от свободной энергии $\mathcal{F}(\theta, V, H) = -\theta \ln Z$. Из этих свойств остановимся только на самом специфическом — исследуем температурное поведение спонтанной намагниченности.

Для намагниченности системы имеем

$$M(\theta, V, H) = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H} = \theta \frac{\partial \ln Z}{\partial H} = N\beta - \sum_k \frac{1}{e^{\varepsilon_k/\theta} - 1} \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial H}.$$

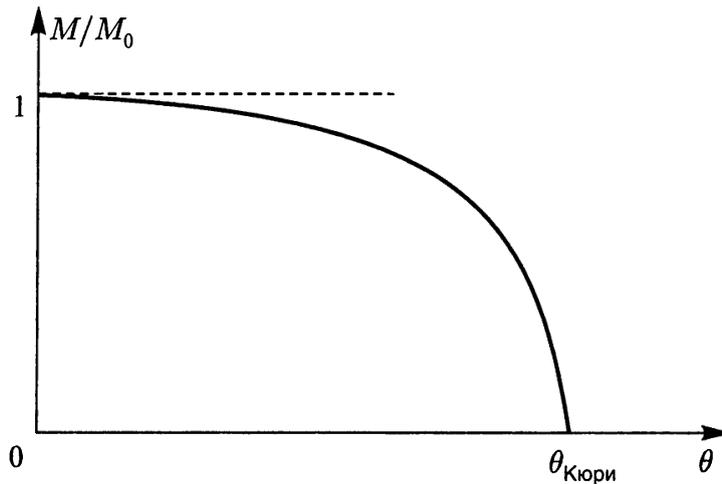


Рис. 43. Температурная зависимость относительной величины спонтанной намагниченности ферромагнетика M/M_0 , где $M_0 = \beta N$ — ее максимальная величина, с характерным поведением $1 - \alpha\theta^{3/2}$ в области $\theta \ll \theta_{\text{Кюри}}$

Учитывая, что $\partial \varepsilon_k / \partial H = 2\beta$, $V = Na^3$, $M_0 = N\beta$, и обозначая $2Ja^2k^2/\theta = x^2$, получаем:

$$\begin{aligned} M &= N\beta - 2\beta \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{\exp\left\{\frac{2\beta H + 2Ja^2k^2}{\theta}\right\} - 1} = \\ &= M_0 \left(1 - \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\theta}{2J}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{\exp\left\{\frac{x^2 + 2\beta H}{\theta}\right\} - 1} \right). \end{aligned}$$

Учитывая, что интеграл по переменной x в случае $H = 0$ выражается через ζ -функцию Римана,

$$\int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{x^2} - 1} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{y^{1/2} dy}{e^y - 1} = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 1,306\dots,$$

получаем для относительной величины спонтанной намагниченности (т. е. величины M в случае отсутствия внешнего поля H) характерную температурную зависимость (начальный участок графика на рис. 43)

$$\left. \frac{M}{M_0} \right|_{H=0} = 1 - \frac{1,306}{\pi^2} \left(\frac{\theta}{2J}\right)^{3/2} = 1 - \alpha\theta^{3/2}.$$

Характерный для ферромагнетиков закон «трех вторых» был установлен впервые Ф. Блохом в 1930 г., и несмотря на то, что формально он получен в приближении $0,131\left(\frac{\theta}{2J}\right)^{3/2} \ll 1$, на эксперименте он дотягивает почти до температуры $\theta_{\text{Кюри}}/2$. Коэффициент α при $\theta^{3/2}$ хоть и мал, но измеряется экспериментально (имеет порядок 10^{-6}), что дает возможность получить экспериментальную оценку обменного взаимодействия J , сопоставив тем самым формальную модель Гейзенберга с реально существующими ферромагнетиками. Оказалось, что $J \sim 2 \cdot 10^{-14}$ эрг ~ 150 К, что вполне сопоставимо с величиной $\theta_0 = cJ$, имеющей порядок температуры Кюри ($\theta_{\text{Кюри}} \sim 10^3$ К) для сильных $3d$ -ферромагнетиков.

Уточнение полученного выше основного результата для низкотемпературного поведения спонтанной намагниченности, связанное с учетом исходной небозевости возбужденных состояний спиновой гейзенберговской системы, оказалось весьма непростым делом. Если влияние отброшенных нами четверных по паули-операторам членов в гамильтониане (имитирующих как бы взаимодействие спиновых волн) можно еще учесть с помощью какого-либо варианта теории возмущений, то для того чтобы исключить вклады, обязанные учету нефизических значений чисел заполнения $N_f = 2, 3, \dots$, т. е. исправить кинематику возбужденных состояний, вернув им паулевский характер, необходимо использовать весьма сложную проекционную технику. Эта проблема только в 1956 г. была с успехом рассмотрена в работе Фримана Дайсона. Разрешив кинематическую проблему в области низких температур (т. е. малого числа возбужденных состояний системы) и произведя затем учет динамической корреляции возбужденных состояний, он получил для отклонения от закона Блоха $\alpha\theta^{3/2}$ дальнейшее температурное разложение в виде

$$\left. \frac{M}{M_0} \right|_{H=0} = 1 - \alpha\theta^{3/2} - \alpha_1\theta^{5/2} - \alpha_2\theta^{7/2} - \alpha_3\theta^4 + O(\theta^{7/2}),$$

где положительные коэффициенты α_i (α_1 и α_2 — кинематического происхождения, α_3 — характеризует динамические корреляции) были сосчитаны им до численных значений для трех видов решеток и величин спинов $s = \frac{1}{2}$, $s = 1$ и $s = \infty$ («классический» ферромагнетик Гейзенберга).

Интересно отметить, что посетивший Москву Дайсон, рассказывая о своей работе на научном семинаре академика Боголюбова, подчеркивал исключительно математический (а не прикладной) характер полученных им результатов (как, впрочем, и формальный характер самой гейзенберговской модели ферромагнетика).

Введение в теорию сверхпроводимости электронного газа в металлах

Создание в 1957–58 гг. микроскопической теории сверхпроводимости оказалось, пожалуй, последним в XX в. крупным достижением статистической физики, вскрывшем механизм явления, которое в течении 47 лет после его открытия не находило адекватного и убедительного физического объяснения. Эта теория разрабатывалась не на пустом месте: в качестве базы она опиралась на достаточно достоверные экспериментальные данные и основывалась на целом ряде предварительных полуфеноменологических теоретических соображений. Остановимся на этих вопросах по возможности кратко (они достаточно полно освещены в известных монографических обзорах по теории сверхпроводимости, например, в капитальном обзоре «Физика низких температур» (ИЛ, 1959) (перевод 14–15 томов *Handbuch der Physik*) главы 8 и 9 содержат более 400 ссылок на оригинальные исследования по вопросам сверхпроводимости, в обзоре Дж. Шриффера «Теория сверхпроводимости» — 194 ссылки и т. д.).

§ 1. Основные экспериментальные и теоретические предпосылки теории сверхпроводимости

Итак, явление сверхпроводимости было открыто Х. Камерлинг-Оннесом в 1911 г. первоначально для ртути (температура фазового перехода в сверхпроводящее состояние составила $T_0 = 4,15$ К). В 1928 г. В. Кеезом, продолживший исследование этого явления, измерил температурную зависимость теплоемкости сверхпроводника в области $0 < T < T_0$. По характеру изменения теплоемкости в области $T \lesssim T_0$ этот переход оказался фазовым переходом 2-го рода с конечной величиной скачка теплоемкости ΔC . В 1934 г. Ф. Лондон предложил для описания свойств сверхпроводящего состояния феноменологическую теорию, которая затем была развита на основе двухжидкостных представлений в основном в работах В. Л. Гинзбурга и Л. Д. Ландау (1950). В 1957 г. Дж. Бардин, Л. Купер и Дж. Шриффер (в дальнейшем БКШ) на основе модели с прямым электрон-электронным взаимодействием и Н. Н. Боголюбов (1958) на основе учета электрон-фононного и кулоновского взаимодействий создали микроскопическую теорию сверхпроводимости, в основном закрыв тем самым почти полувековой «долг» теоретической физики перед экспериментаторами, работающими в области физики низких температур.

Интересно в связи с этим отметить своеобразный параллелизм в создании теории сверхтекучести неидеальной бозе-системы с развитием теории сверхпроводимости. В 1910 г. Камерлинг-Оннес получил жидкий гелий и начал исследовать его свойства ниже 4 К. Переход в состояние He-II оказался фазовым переходом не 2-го рода, а λ -типа (логарифмическая особенность в температурном поведении теплоемкости

в области $T_0 \cong 2,17$ К была с точностью до $|T - T_0| \sim 10^{-6}$ К убедительно подтверждена экспериментально М. Бекингом уже только в 1958 г.). В 1938 г. П. Л. Капица открыл явление сверхтекучести гелия-II через капилляры, щели и поверхностную пленку. В том же году Л. Тисса предложил двухжидкостную модель гелия-II — феноменологическую теорию, которая затем была развита Л. Д. Ландау в 1941 г. Теоретическое объяснение уникальных свойств вырожденного неидеального бозе-газа, связанных с наличием в нем макроскопической доли бозе-конденсата, было дано Н. Н. Боголюбовым в его работах 1946–47 гг.

Прошедший затем 10-летний период до появления теории сверхпроводимости БКШ был наполнен теоретическими попытками истолковать явление сверхпроводимости на основе созданных представлений о сверхтекучести бозе-газа, для чего в системе ферми-частиц (каковыми являются несущие электрический заряд электроны) необходимо было теоретически обосновать возможность существования бозеподобных комплексов, способных к конденсации, и тогда сверхпроводимость могла бы с легкостью интерпретироваться как сверхтекучесть подобных электронных комплексов. Подобные представления и аналогии нашли свою убедительную реализацию не только в физическом, но и в математическом выражении лишь в работах Н. Н. Боголюбова 1958 г.

После этого «исторического» введения остановимся на тех данных (экспериментальных и общефизических), которые послужили в качестве наводящих соображений при построении теории сверхпроводимости. Прежде всего (см. гл. 2, § 2, п. ж)), это рациональное моделирование системы, т. е. создание микроскопической модели (конкретнее, модельного гамильтониана системы, подлежащей рассмотрению), математическая обработка которой методами статистической физики выявила бы интересующий нас эффект (в этой процедуре создания модели, которая заранее содержит подлежащий объяснению эффект, конечно же есть определенная доля лукавства, присущая почти всем микроскопическим, т. е. теоретическим исследованиям и объяснениям макроскопически наблюдаемых явлений).

Чтобы сделать наше рассмотрение более универсальным и отвлечься от конкретных деталей ионной решетки, в которой находится газ электронов проводимости, геометрии зон Бриллюэна и т. д., будем исходить из модели «желе» — равномерно положительно заряженной среды, являющейся компенсирующим общий заряд фоном для электронного газа, а особенности движения электронов в периодическом поле учтем, полагая массу носителей заряда m эффективной.

Этот ионный фон не является чем-то замороженным. В интересующем нас диапазоне температур $0 < \theta < \theta_0 \sim 10$ К (который лежит значительно ниже дебаевской температуры, имеющей порядок сотен градусов Кельвина) температурное состояние ионной решетки обеспечивается газом длинноволновых фононов (т. е. с частотами, составляющими по крайней мере половину, а то и четверть дебаевской, соответствующей «длине» волны порядка межатомного расстояния $a = \sqrt[3]{V/N}$). Именно эти возбуждения ответственны за характерное температурное поведение теплоемкости решетки $C_{\text{реш}} \sim \theta^3$ (оказывающейся при $\theta \sim 10$ К пренебрежимо малой по сравнению с теплоемкостью нормального электронного газа $C_{\text{эл}} \sim \theta$).

При температурах порядка 10 К электронный газ существенно вырожден ($\epsilon_F = p_F^2/(2m) \sim 10^5 - 10^6$ К), и возбужденные его состояния по энергии концентрируются в непосредственной близости к уровню Ферми. Как показывает самая грубая оценка (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. в), подпункт 3), затухание Γ_p этих возбуждений вследствие взаимодействия электронов друг с другом вблизи границы Ферми ведет себя как $(p - p_F)^2$, в то время как энергия возбужденного электрона, покинувшего заполненную

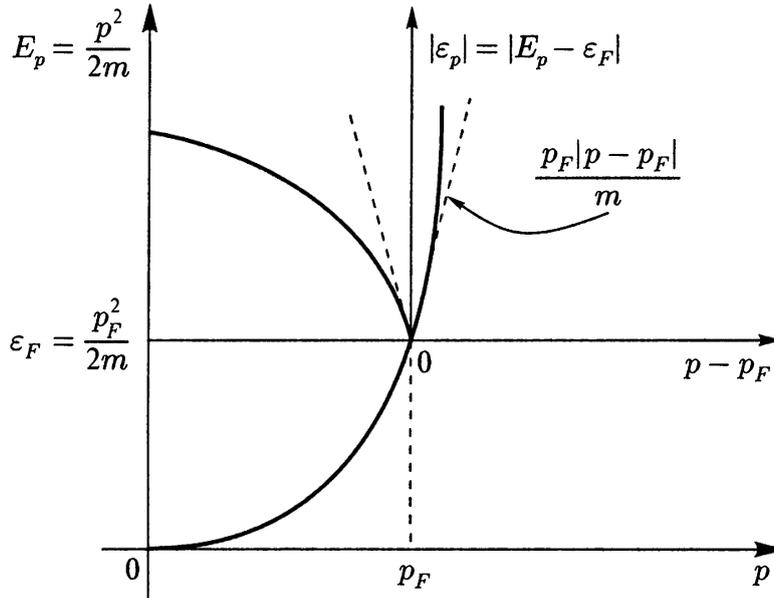


Рис. 44. Характер зависимости энергии возбужденных состояний от импульса в идеальном ферми-газе, моделирующем «нормальное» состояние вырожденного электронного газа в металлах

сферу Ферми

$$\varepsilon_p = \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m} \right) \cong \frac{p_F(p - p_F)}{m} \sim (p - p_F).$$

Поэтому вблизи границы Ферми величина $\Gamma_p/\varepsilon_p \sim (p - p_F)$ оказывается исчезающе малой. Полагая разность $|p - p_F|$ равной максимальному значению, соответствующему границе температурного размывания сферы Ферми, получаем, что $\Gamma_p/\varepsilon_p \sim \theta/\varepsilon_F$, что в нашем случае соответствует величине $10^{-4} - 10^{-5} \ll 1$ и что полностью оправдывает использование в качестве модели электронного газа его представление идеальным ферми-газом с характерной для него температурной зависимостью удельной теплоемкости $C_{эл} \cong \pi^2 \theta / (2\varepsilon_F)$, целиком обязанной именно частично-дырочному характеру возбуждений над его основным состоянием — заполненной сферой Ферми.

Учет взаимодействия электронов друг с другом и с колебаниями решетки, производимый методами теории возмущений, уточнил, но не изменил основного характера поведения электронного газа, так как структура его основного и возбужденного состояний в принципе оставалась той же, что и для идеального газа (см. рис. 44) (после открытия явления сверхпроводимости такие системы стали именовать «нормальными»). Влияние же рассеяния электронов на колебаниях решетки, рассчитанное еще Феликсом Блохом (см. т. 3, гл. 5, § 7, п. в), подпункт 4), определило температурную зависимость удельного сопротивления металла в области $\theta < \theta_D$ как $\rho \sim \theta^5$, которое не доходя до нуля блокируется слабо зависящим от температуры остаточным сопротивлением, связанным с рассеянием электронов на примесях и дислокациях (см. рис. 45).

Таким образом, учет неидеальности электронного газа в металлах методами регулярной квантово-механической теории возмущений в виде разложений по степеням константы связи $g = e^2$, несмотря на достаточно реалистичное объяснение особенностей электронного газа в состоянии нормальной фазы, эффекта сверхпроводимости, т. е. взаимного исчезновения целиком всего сопротивления при понижении температуры до уровня θ_0 , выявить не смог.

Перейдем теперь к обсуждению характерных для явления сверхпроводимости экспериментальных данных, известных задолго до появления теории сверхпроводимости.

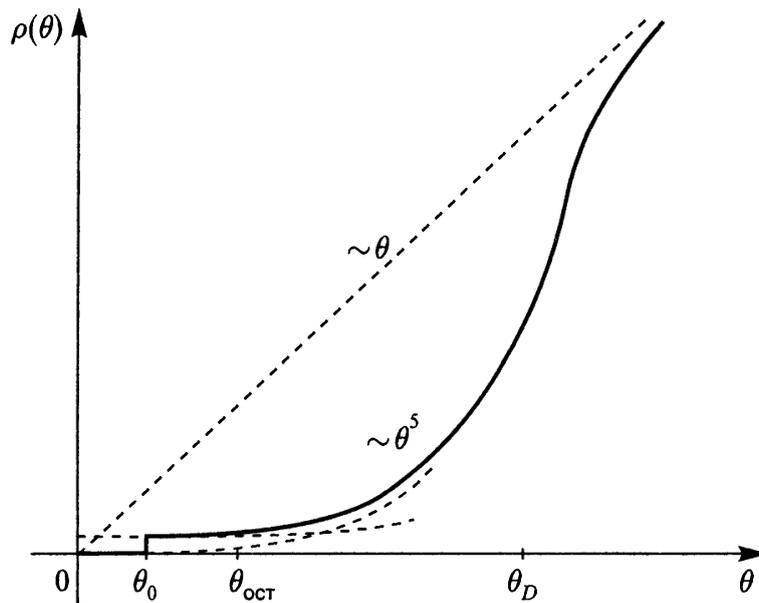


Рис. 45. Характер температурной зависимости удельного сопротивления металла ρ : $0 < \theta < \theta_0$ — область сверхпроводимости, $\rho = 0$; $\theta_0 < \theta < \theta_{\text{ост}}$ — область остаточного сопротивления, $\rho \cong \text{const}$; $\theta_{\text{ост}} < \theta < \theta_D$ — область рассеяния на колебаниях решетки, $\rho \sim \theta^5$; $\theta > \theta_D$ — область рассеяния электронов на некоррелированно движущихся ионах решетки, $\rho \sim \theta$

мости и послуживших наводящими соображениями при ее формировании. Первое соображение касается величины температуры θ_0 фазового перехода в сверхпроводящее состояние. Оказалось, что учет электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий в энергетическом выражении определяет величины порядка 1 эВ (в этом несложно убедиться, прикинув к примеру величину средней энергии кулоновского взаимодействия электронов e^2/a , где $e \cong 4,8 \cdot 10^{-10}$ CGSE и $a = \sqrt[3]{V/N} \sim 10 \text{ \AA}$, что дает $e^2/a \cong 2 \cdot 10^{-12}$ эрг $\cong 1$ эВ, так как $1 \text{ эВ} \cong 1,6 \cdot 10^{-12}$ эрг $\cong 11\,600 \text{ K}$), в то время как температура фазового перехода имеет порядок $\theta_0 \sim 10 \text{ K} \cong 10^{-3}$ эВ, т. е. в тысячу раз меньше. В связи с этим результатом становится понятным, почему разложение по степеням $g = e^2$ (т. е. формальная теория возмущений, рассчитанная на описание нормальных ферми-систем) не смогло уловить эффект сверхпроводимости, так как зависимость ее ключевого параметра θ_0 от константы взаимодействия g оказалась более слабой, чем первая или какая-либо еще ее степень. Тем самым в задачу микроскопической теории включается уже математическая проблема определения этой слабой и, главное, неаналитической (т. е. не представляемой в виде регулярного ряда по степеням g) зависимости.

Далее, произведенные Кеезом измерения теплоемкости сверхпроводников при $\theta < \theta_0$ выявили характерную ее температурную зависимость, включающую фактор $e^{-\Delta/\theta}$, что с несомненной определенностью (см. т. 2, гл. 2, § 3) указывает на то, что энергия низлежащих элементарных возбуждений системы, создающих температурное ее состояние, отделена от энергии основного состояния энергетической щелью порядка Δ (напомним, кстати, что в обладающем свойством сверхтекучести неидеальном бозе-газе подобной энергетической щели нет, и низлежащие возбужденные состояния системы, имеющие характер фононов, обеспечивают кубическую зависимость теплоемкости от температуры $C \sim \theta^3$).

Наличие такой щели означает существенную перестройку всего характера теплового движения в системе именно в области $\theta < \Delta$ и еще многое другое. Прежде всего, перестраивается не только структура возбужденных состояний (см. рис. 46), которая

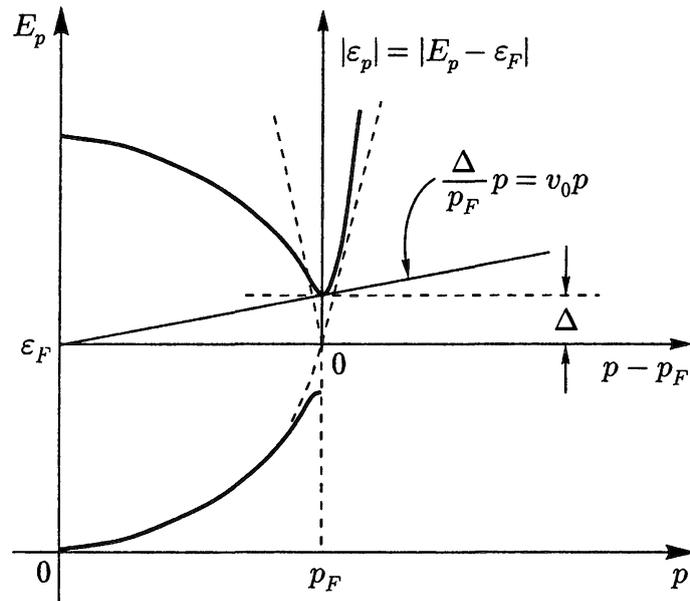


Рис. 46. Характер зависимости энергии возбужденных состояний от импульса в случае появления энергетической щели Δ над основным состоянием ферми-системы; $v_0 = \Delta/p_F$ — критическая скорость незатухающего движения системы в соответствии с критерием Ландау

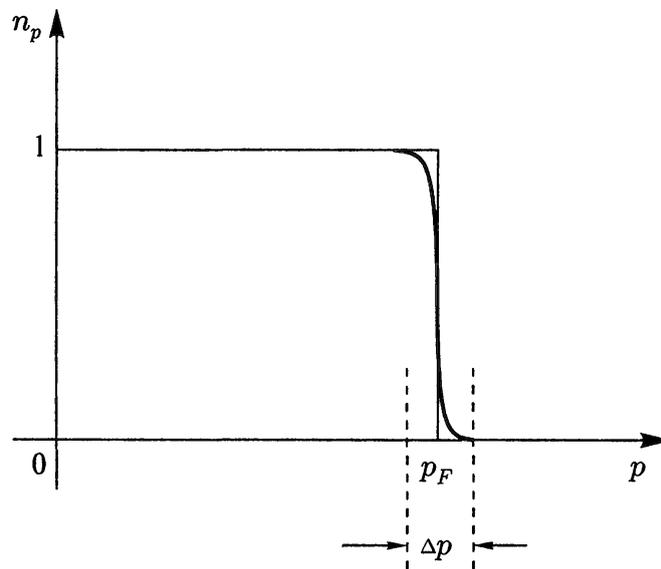


Рис. 47. Характер изменения структуры основного состояния идеального ферми-газа в случае появления в спектре возбуждений над этим состоянием энергетической щели Δ . Относительная величина области размытия сферы Ферми по импульсу $\Delta p/p_F \sim \Delta/\epsilon_F \sim 10^{-4}$

в непосредственной близости к границе Ферми уже не имеет частично-дырочного характера, но и основное состояние ферми-системы (см. рис. 47) — резкая граница сферы Ферми оказывается при $\theta = 0$ размытой в интервале порядка Δ в окрестности ϵ_F . Хотя это размытие относительно мало ($\epsilon_F \sim 10^5$ К, а величина $\Delta \sim 10$ К), именно в этой области, определяющей поведение системы при $\theta < \theta_0$, вследствие отсутствия резкой границы в ферми-распределении становятся невозможными возбуждения электрон-дырочного типа.

Следуя навязчивой идее сопоставить сверхпроводящее состояние электронного газа сверхтекучести гелия-II, мы должны предположить, что возбужденные системы электронов при $\theta < \theta_0$ становятся бозеподобными. Так как ферми-частицы в бозев-

ские превратить невозможно, то остается единственная возможность предположить, что в сверхпроводящей фазе вблизи ферми-поверхности формируются в качестве возбужденных состояний комплексы из четного числа ферми-частиц (по крайней мере из двух электронов) с общим нулевым (или целым) значением спина и скомпенсированным значением общего импульса (напомним, что вблизи поверхности Ферми импульсы электронов имеют порядок $p_F = \hbar(3\pi^2 N/V)^{1/3}$, что соответствует их скорости $v_F = p_F/m = \sqrt{2\varepsilon_F/m} \sim 2 \cdot 10^8$ см/с). В этом предположении нет ничего фантастического, так как бозе-частицы, составляющие жидкий гелий, не элементарны, а представляют собой ядра He^4 , окруженные динамически связанными с ними парами электронов в s -состоянии и с общим нулевым спином.

Предположение о существовании энергетической щели $\Delta \sim 10$ К позволяет оценить из самых общих соображений корреляционный размер этих бозеподобных образований. Действительно, так как

$$\varepsilon_p = |E_p - \varepsilon_F| \cong \frac{p_F \Delta p}{m} \geq \Delta,$$

и размытие основного состояния идеальной ферми-системы по импульсу составляет величину

$$\Delta p \cong 2 \frac{m}{p_F} \Delta = \frac{\Delta}{\varepsilon_F} p_F,$$

то в соответствии с соотношением неопределенностей

$$R_{\text{корр}} \sim \frac{\hbar}{2} (\Delta p)^{-1} = \frac{\varepsilon_F}{\Delta} \left(\frac{V}{3\pi^2 N} \right)^{1/3} \cong \frac{1}{3} \frac{\varepsilon_F}{\Delta} a \cong 3 \cdot 10^4 \text{ \AA} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ см},$$

что в 10^3 раз превышает период кристаллической решетки и среднее расстояние между электронами $a = \sqrt[3]{V/N}$ (т. е. эти бозеподобные комплексы пространственно не изолированы друг от друга, а образуют единый конгломерат, так как внутри сферы радиуса $R_{\text{корр}}$ находится очень много перекрывающихся друг друга подобных же квантовых образований) и тем более томас-фермиевский радиус экранировки электростатического взаимодействия электронов (см. гл. 3, § 6, п. ж))

$$R_{TF} = \frac{1}{\kappa_{TF}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_F}{6\pi e^2 n}} \sim 10^{-8} \text{ см}.$$

Самая простая из возможных бозеподобных конструкций из ферми-частиц — это пара электронов с противоположными спинами и противоположными (или почти противоположно направленными) импульсами. Грубая оценка возможности возникновения связанного состояния таких фермионов была сделана Л. Купером в 1956 г., и эта его работа послужила определяющим стимулом в формулировке теории БКШ.

Прежде всего отметим, что возбуждения «нормального» ферми-газа тоже как бы двухчастичны: вышедший из заполненной сферы Ферми электрон оставляет на своем прежнем месте в импульсном пространстве дырку — незанятое состояние, — которая на фоне заполненной ферми-сферы ведет себя как частица с противоположным спином и электрическим зарядом. Эти возбуждения, характерные для нормальных ферми-систем, не образуют коррелированных состояний и, кроме того, не несут электрического заряда. В интересующем нас случае предполагаемое возможным возбужденное состояние имеет совершенно иную структуру — это квазисвязанное (т. е. сильно коррелированное) состояние пары частиц (или пары дырок) над (или непосредственно под) сферой Ферми с противоположными импульсами и спинами,

имитирующее «конденсатную» частицу эквивалентной бозе-системы. Мы проведем несложную квантово-механическую оценку этой возможности в максимально упрощенном и достаточно грубом варианте, так как для наших целей она будет иметь характер лишь наводящего соображения.

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$(H_0 + U)\psi = E\psi$$

для системы двух взаимодействующих друг с другом электронов с импульсами непосредственно над сферой Ферми, энергия каждого из которых, отсчитываемая от уровня $\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m}$, равна $\varepsilon_p = E_p - \varepsilon_F = \frac{p_F}{m}(p - p_F) > 0$, и оценим в приближении слабого их взаимодействия друг с другом $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ возможное значение энергии этого двухчастичного комплекса E , полагая пробную волновую функцию соответствующей «конденсатному» бозеподобному состоянию $(\mathbf{p}, \uparrow; -\mathbf{p}, \downarrow)$, образованному в нулевом приближении из плоских волн $\varphi_p(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}/\sqrt{V}$, т. е.

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \Phi_p e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}$$

(спиновое состояние пары (\uparrow, \downarrow) , как мы показали в гл. 1, § 4 п. е), исключает квантовую корреляцию ферми-частиц, связанную с учетом принципа Паули). Обозначим матричный элемент оператора взаимодействия электронов U , рассчитанный с помощью этой функции, как

$$U(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p}, -\mathbf{p} | U | \mathbf{p}', -\mathbf{p}' \rangle.$$

Тогда получим в импульсном представлении из исходного уравнения

$$(E - 2\varepsilon_p)\Phi_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} U(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\Phi_{\mathbf{p}'}$$

Это уравнение, конечно, в общем виде не решается.

Чтобы преодолеть математические трудности дальнейшего исследования и получить оценку ожидаемого эффекта, откажемся от исходно локального характера динамического взаимодействия электронов, когда $U(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \nu(|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|)$, и аппроксимируем матричный элемент $U(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ мультипликативной конструкцией

$$U(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -J\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}'),$$

сосредоточенной и имеющей постоянную величину в энергетическом слое ширины ω около уровня ε_F (модель взаимодействия в теории сверхпроводимости БКШ),

$$\theta(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega. \end{cases}$$

В случае такого модельного взаимодействия уравнение Шредингера приобретает вид

$$(E - 2\varepsilon_p)\Phi_p = -J\theta(\mathbf{p})\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} \theta(\mathbf{p}')\Phi_{\mathbf{p}'},$$

позволяющий сразу же выписать его решение

$$\Phi_p = -J\theta(\mathbf{p})\frac{C}{E - 2\varepsilon_p},$$

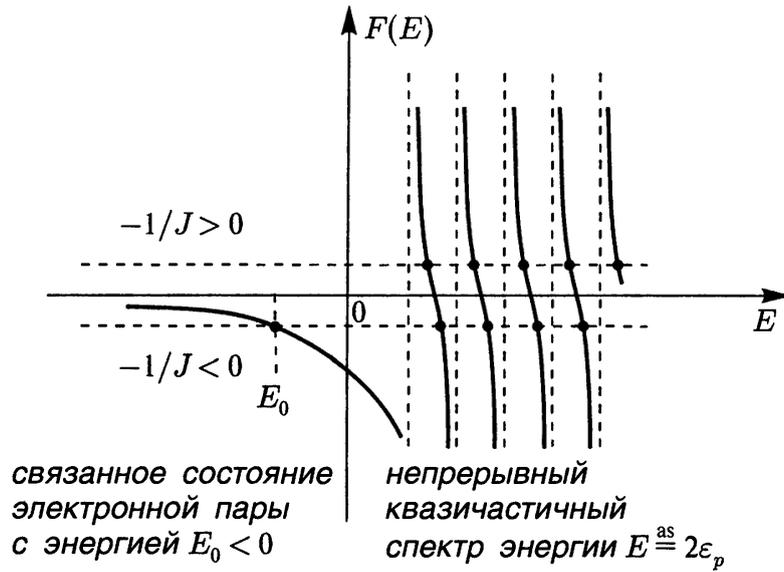


Рис. 48. Графическое исследование решений уравнения $F(E) = -1/J$ (отмечены жирными точками) для собственных значений энергии двухчастичных возбуждений вырожденного электронного газа типа $(\mathbf{p}, \uparrow; -\mathbf{p}, \downarrow)$ над сферой Ферми

где

$$C = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} \theta(\mathbf{p}') \Phi_{\mathbf{p}'}$$

Подставляя полученное решение для $\Phi_{\mathbf{p}}$ в формулу для C , получаем, исключая тривиальное решение уравнения Шредингера (т. е. случай $C = 0$), уравнение для собственных значений E (мы учли, что $\theta^2(\mathbf{p}) = \theta(\mathbf{p})$)

$$-\frac{1}{J} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \theta(\mathbf{p}) \frac{1}{E - 2\epsilon_{\mathbf{p}}} = F(E).$$

Графическое исследование решений этого уравнения (см. рис. 48) показывает, что отделившееся от непрерывного спектра квазичастичных возбуждений решение $E_0 < 0$, лежащее ниже уровня энергии заполненной сферы Ферми и соответствующее связанному состоянию электронной пары, возможно только в случае $J > 0$, т. е. в случае наличия динамического притяжения электронов друг к другу.

Чтобы определить это собственное значение E_0 , перейдем в последнем уравнении к интегрированию по импульсу. Тогда, взяв интеграл по углам, получим, переходя от интегрирования по модулю импульса к интегрированию по энергии $\epsilon = \epsilon_{\mathbf{p}}$,

$$-\frac{1}{J} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\omega} \left(\frac{4\pi p^2 dp}{d\epsilon} \right) \frac{d\epsilon}{E_0 - 2\epsilon}.$$

Полагая, что интегрирование по ϵ производится в пределах узкого слоя вблизи ферми-уровня ϵ_F , положим

$$\rho = J \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p^2}{\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{p}}}{\partial p}} \cong J \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{p_F^2}{\left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{p}}}{\partial p} \right)_{p=p_F}} = \text{const} > 0.$$

Тогда получающееся уравнение интегрируется по $x = 2\epsilon$ сразу,

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{2} \int_0^{2\omega} \frac{dx}{x + |E_0|} = \frac{1}{2} \ln(x + |E_0|) \Big|_{x=0}^{x=2\omega} = \frac{1}{2} \ln \frac{|E_0| + 2\omega}{|E_0|},$$

откуда в пределе слабого притяжения электронов к друг другу, когда параметр этого взаимодействия $\rho \ll 1$, получаем

$$|E_0| = \frac{2\omega}{e^{2/\rho} - 1} \cong 2\omega e^{-2/\rho}.$$

Заметим теперь, что вследствие трансляционной инвариантности рассматриваемой модельной системы она ковариантна по отношению к изменению начала отсчета импульсов и скоростей. Поэтому, если ввести новую систему отсчета импульсов всех частиц, $\mathbf{p} \mapsto \mathbf{p} - m\mathbf{v}$, то энергия интересующего нас связанного состояния уже в «движущемся» состоянии всей системы в обычной покоящейся системе отсчета будет равна (см. также для сравнения гл. 3, § 2, п. г))

$$E_v = E_0 - (\mathbf{p} \mathbf{v}).$$

Если положить $\mathbf{q} = m\mathbf{v} = (q, 0, 0)$ и учесть, что в уравнении для энергии E интегрирование осуществляется только в небольшой окрестности около сферы Ферми, то в случае движущейся системы в этом уравнении вместо величины $|E_0|$ будет стоять $|E_q| = |E_0| - \frac{p_F}{m} q$, и для критической скорости v_0 (или импульса $q_0 = mv_0$) пары уже движущихся электронов, ниже которой сохраняется связанное их состояние, получим в соответствии с условием $|E_q| = 0$ уже знакомое нам соотношение

$$mv_0 = q_0 = \frac{|E_0| m}{p_F} = \frac{|E_0|}{\epsilon_F} \frac{1}{2} p_F \sim \frac{1}{2} \frac{\Delta}{\epsilon_F} p_F \sim 10^{-4} p_F.$$

Однако не следует думать, что проведенное выше рассмотрение решает вопрос о величине критического тока и закрывает проблему сверхпроводимости. Прежде всего, эта проблема должна решаться не на элементарном квантово-механическом уровне задачи двух тел, а на уровне многочастичной квантово-статистической теории. И потом, что является главным, по самому построению, исходящему из конструкции пробной функции $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, щелевого характера спектра возбуждений в данном расчете в принципе возникнуть не может. Ценность же проведенного предварительного исследования состоит в оценке энергии связи куперовской пары с характерной ее неаналитической зависимостью от характеризующей притяжение частиц константы связи J , при сколь угодно малой ее величине включающей фактор $e^{-\text{const}/J} \ll a_n J^n$, не поддающейся расчету по теории возмущений, оперирующей разложениями по степеням этого параметра.

Таким образом, следующим этапом предварительного рассмотрения проблемы сверхпроводимости становится проблема отыскания корреляционного механизма, имеющего характер притяжения, необходимого для существования устойчивых бозе-подобных конструкций типа пар $(\mathbf{p}, \uparrow; -\mathbf{p}, \downarrow)$.

Из динамических факторов рассматриваемой нами модели электронного газа в металле мы имеем только два реально существующих механизма взаимодействия. Это — кулоновское взаимодействие электронов друг с другом.

$$H_c = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \neq 0} \nu(\mathbf{q}) a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}'} a_{\mathbf{p}},$$

где $\nu(q) = 4\pi e^2 \hbar^2 / q^2$, и взаимодействие электронов с колебаниями ионной решетки (имеющее в принципе также электростатическую природу), которое в длинноволновом для фононов диапазоне достаточно убедительно аппроксимируется гамильтонианом Х. Фрелиха (1950 г., см. более подробно гл. 1, § 3, п. о))

$$H_f = \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_q f(q) (\rho_q b_q^+ + \rho_q^+ b_q) = \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{p,q} f(q) (a_{p+q}^+ a_p b_q^+ + a_{p-q}^+ a_p b_q),$$

где $f(q) = \gamma \sqrt{2\omega(q)/(nMc^2)}$ и $\omega(q) = cq$ — энергия фонона. Так как нам необходимо выявить динамическую ситуацию в области размытия сферы Ферми, характеризуемой величиной $\Delta p \sim q_0 \sim 10^{-4} p_F$, а $p_F/\hbar = k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3} \cong 3/a \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$ (т. е. $\lambda_0 \sim \hbar/q_0 \sim 10^{-4} \text{ см} \sim 10^3 a$), то длинноволновая аппроксимация взаимодействия электронов с колебаниями кристаллической решетки, собственно, только и учитываемая в фрелиховском гамильтониане H_f , вполне пригодна для нашего дальнейшего рассмотрения.

Ввиду того что импульсы электронов в рассматриваемой области имеют порядок p_F , а размер этой области $\Delta p \ll p_F$, то вместо исследования явления сверхпроводимости на основе учета электрон-фононного механизма его образования, как это было сделано в основополагающей монографии Н. Н. Боголюбова, В. В. Толмачева и Д. В. Ширкова «Новый метод в теории сверхпроводимости» (М.: Изд. АН СССР, 1959), можно ввести индуцированное полем фононов (т. е. передаваемое длинноволновыми колебаниями решетки) эффективное усредненное по фононам прямое взаимодействие электронов друг с другом по схеме, изображенной на рис. 49, исключив тем самым эффекты «запаздывания» передачи импульса q и сводя это индуцированное фононами взаимодействие к мгновенному.

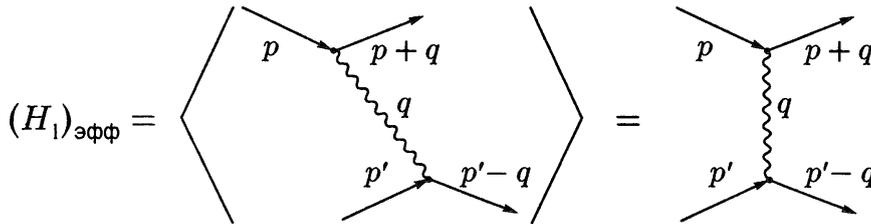


Рис. 49. Схема введения индуцированного колебаниями решетки прямого эффективного взаимодействия электронов

Чтобы реализовать эту схему, представим уравнение Шредингера в виде его формального решения,

$$(E - H_0)\psi = H_f \psi \mapsto \psi = \frac{1}{E - H_0} H_f \psi,$$

и подставим это решение в правую часть исходного уравнения,

$$(E - H_0)\psi = H_f \frac{1}{E - H_0} H_f \psi = \tilde{H}_1 \psi,$$

образовав тем самым необходимый нам второй порядок по взаимодействию H_f уже в «нулевом» приближении. Воспользовавшись формальной теорией возмущений (см. гл. 3, § 2, п. а)), выделим этот второй порядок в чистом виде,

$$\tilde{H}_1 = H_f \frac{P}{E_0 - H_0} H_f + \dots \cong H_f \frac{P}{E_0 - H_0} H_f,$$

где E_0 — энергия основного состояния идеальной системы H_0 (т. е. заполненной сферы Ферми), и усредним это выражение по фоновым состояниям, учитывая, что в рассматриваемой нами области температур $\theta \cong 0$ плотность этих состояний $n_q \cdot 4\pi q^2 / (2\pi\hbar)^3$ чрезвычайно мала, и поэтому можно принять аппроксимацию

$$\langle b_{q'} b_q^+ \rangle = \overline{b_{q'} b_q^+} = \Delta(q - q') + \overline{b_q^+} b_{q'} = \Delta(q - q')(1 + n_q) \cong \Delta(q - q').$$

Тогда будем иметь (условие $q \neq 0$ возникает в результате учета операции P)

$$\langle \tilde{H}_1 \rangle = \frac{1}{2V} \sum_{p, p', q \neq 0} f^2(q) \frac{a_{p'-q}^+ a_{p'} b_q a_{p+q}^+ a_p b_q^+}{-(E_{p+q} - E_p + \omega(q))} = \frac{1}{2V} \sum_{p, p', q \neq 0} f^2(q) \frac{a_{p'-q}^+ a_{p'} a_{p+q}^+ a_p}{-(E_{p+q} - E_p + \omega(q))}.$$

Располагая ферми-операторы в привычном для оператора H_1 «нормальном» порядке и отнеся возникшие в результате перестановок этих операторов слагаемые, включающие комбинацию $a_p^+ a_p$ к нулевому гамильтониану (как бы перенормировка исходной величины E_p), получаем для эффективного взаимодействия электронов

$$(\tilde{H}_1)_{\text{эфф}} = \frac{1}{2V} \sum_{p, p', q \neq 0} \left[-\frac{f^2(q)}{E_{p+q} - E_p + \omega(q)} \right] a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p.$$

Так как по смыслу проведенной операции по выделению второго по H_f порядка $E_{p+q} > \varepsilon_F$ и $E_p < \varepsilon_F$, т. е. для всех значений $q \neq 0$ $E_{p+q} - E_p + \omega(q) > 0$, то выражение в квадратных скобках всегда меньше нуля, что определяет характер индуцированного фононами взаимодействия электронов как притяжение. Таким образом, корреляция электронов определяется помимо принципа Паули двумя динамическими механизмами: это, с одной стороны, кулоновское отталкивание, имеющее эффективный радиус порядка $R_{TF} = 1/\kappa_{TF} \sim a$, измеряемый несколькими ангстремами, и индуцированное колебаниями решетки притяжение, радиус действия которого соизмерим с длиной волны тех колебаний ионной решетки, которые это притяжение создают, т. е. в соответствии с приведенными ранее оценками радиус этого взаимодействия по крайней мере в 10^3 раз больше межатомного расстояния $a = \sqrt[3]{V/N}$. В целом же вместе с кулоновским взаимодействием электронов в интересующей нас области имеет вид, схематически представленный на рис. 50.

Если попытаться истолковать полученный специфически квантовый эффект с помощью классических представлений и наглядных картинок (т. е., по- существу, с помощью обиходных макроскопических понятий — стойкое заблуждение, исходящее, в известной мере, от самих основателей квантовой теории), то выявленное нами индуцированное фононами пространственно протяженное «притяжение» электронов (это взаимодействие в обычном понимании нелокально и интерпретируется с помощью эффективного потенциала $\tilde{\Phi}(R)$ весьма условно) может не только послужить основой для образования куперовских пар, но и в силу именно своего дальнего действия подавить влияние кулоновского отталкивания, эффективно действующего на расстоянии $R < R_{TF}$, и рассеяния на создающих остаточное сопротивление примесях и дислокациях, также имеющих радиус действия порядка периода решетки $a = \sqrt[3]{V/N}$ (авторы теории БКШ полагали, что для подавления кулоновского отталкивания достаточно предположить, что средняя величина $\langle U_{\text{кул}} + U_{\text{эл-фон}} \rangle < 0$; этот чисто условный и откровенно качественный критерий необходимо будет уточнить в дальнейшем).

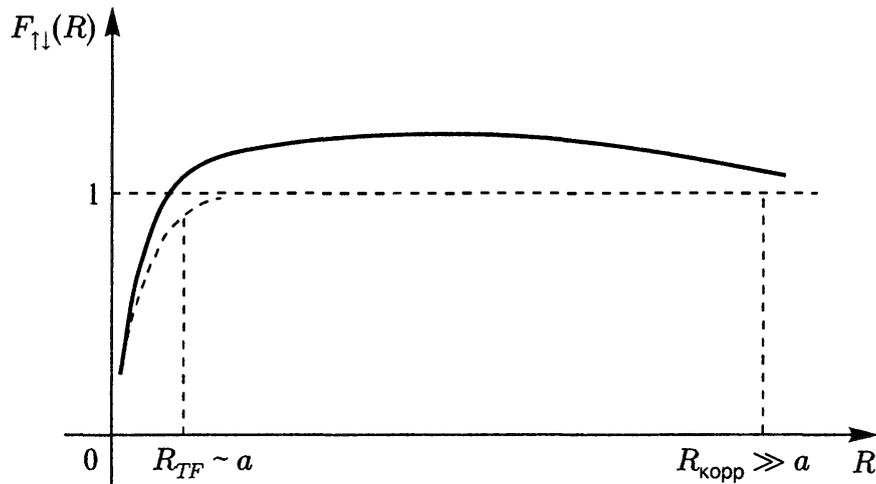


Рис. 50. Характер зависимости парной корреляционной функции электронов $F_{\uparrow\downarrow}(R)$ от расстояния между ними с учетом электрон-фононного и кулоновского взаимодействий

В результате проведенного нами предварительного рассмотрения проблемы сверхпроводимости мы можем в качестве исходной микроскопической модели системы использовать оператор Гамильтона $\mathcal{H} = H - \mu N$ вида

$$\mathcal{H} = \sum_{p,s} \varepsilon_p a_{ps}^+ a_{ps} + \frac{1}{2V} \sum_{p,s;p',s';q \neq 0} \nu(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}) a_{p+q,s}^+ a_{p'-q,s'}^+ a_{p',s'} a_{p,s},$$

в котором $\varepsilon_p = E_p - \mu$, а нелокальное взаимодействие $\nu(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q})$ ферми-частиц существенно для возникновения сверхпроводящего состояния в основном в области $\Delta p \sim 10^{-4} p_F$, прилегающей к сфере Ферми, область же суммирования по значениям вектора \mathbf{q} может составлять лишь длинноволновую долю от связанного с дебаевской частотой своего максимального значения. Мы не будем конкретизировать эту функцию, так как в конечном счете для доведения математических расчетов до конца нам все равно придется прибегнуть к разумным модельным представлениям об этом взаимодействии (примером такого моделирования может послужить проведенное нами выше рассмотрение эффекта Купера).

§ 2. Исследование системы с прямым эффективным взаимодействием электронов

а) Выделение части гамильтониана, ответственной за формирование куперовских состояний

Полагая на основе проведенного выше анализа, что в возникновении сверхпроводящих состояний важную роль играет механизм образования коррелированных бозеподобных пар $(\mathbf{p}, s; -\mathbf{p}, -s)$, выделим в полном гамильтониане \mathcal{H} ту часть \mathcal{H}' , которая способствует их возникновению,

$$\mathcal{H}' = \sum_p \varepsilon_p (a_{p\uparrow}^+ a_{p\uparrow} + a_{p\downarrow}^+ a_{p\downarrow}) - \frac{1}{V} \sum_{p \neq p'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') a_{-p\downarrow}^+ a_{p\uparrow}^+ a_{p'\uparrow} a_{-p'\downarrow},$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'' = \mathcal{H} - \mathcal{H}' = & -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}', \mathbf{q} \neq 0} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}) a_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}\uparrow}^+ a_{\mathbf{p}'\uparrow} a_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}\downarrow} - \\ & - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (a_{-\mathbf{p}\uparrow}^+ a_{\mathbf{p}\uparrow}^+ a_{\mathbf{p}'\uparrow} a_{-\mathbf{p}'\uparrow} + a_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}'\downarrow} a_{-\mathbf{p}'\downarrow}) - \\ & - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}', \mathbf{q} \neq 0} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}) (a_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}\uparrow}^+ a_{\mathbf{p}\uparrow}^+ a_{\mathbf{p}'\uparrow} a_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}\uparrow} + a_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}'\downarrow} a_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}\downarrow}), \end{aligned}$$

где в соответствии с проведенным нами предварительным анализом предполагается, что величина $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -\nu(-\mathbf{p}', \mathbf{p}', \mathbf{p}' - \mathbf{p}) > 0$ (эффективное притяжение электронов с противоположно направленными импульсами и спинами). Заметим, что именно часть гамильтониана \mathcal{H}' являлась основой теории БКШ, в которой величина условного взаимодействия $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ полагалась некоторой константе, сосредоточенной вблизи ферми-уровня (эта модель уже фигурировала у нас при рассмотрении эффекта Купера). Заметим также, что второй член в операторе \mathcal{H}' , учитываемый с помощью теории возмущений по состояниям идеальной системы \mathcal{H}_0 , приводит к нулевым вкладам (если даже в нем сохранить слагаемые с $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$, то эти вклады будут иметь нулевой статистический порядок $N^0 = 1$ вместо необходимого первого по N), что совершенно естественно, так как ожидаемые от его учета сдвиги в энергии основного состояния и свободной энергии системы должны быть слабее любой степени константы связи, входящей в функцию ν , и предварительно иметь неаналитическую структуру типа $e^{-1/\rho}$.

б) $(u-v)$ -преобразование Боголюбова ферми-операторов исходной модели

Чтобы реально выявить корреляцию $(\mathbf{p}, \uparrow; -\mathbf{p}, \downarrow)$ -состояний, определяемую взаимодействием $\mathcal{H}'_1 = \mathcal{H}' - \mathcal{H}_0$, применим с успехом использованный для аналогичной цели в теории неидеального бозе-газа (см. гл. 4, § 2, п. в)) прием: введем новые ферми-операторы, перепутывающие эти состояния, положив

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}\uparrow} &= u_p \alpha_p + v_p \beta_p^+, & a_{\mathbf{p}\uparrow}^+ &= u_p \alpha_p^+ + v_p \beta_p, \\ a_{-\mathbf{p}\downarrow} &= u_p \beta_p - v_p \alpha_p^+, & a_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ &= u_p \beta_p^+ - v_p \alpha_p. \end{aligned}$$

Связь коэффициентов этого $(u-v)$ -преобразования (условие его каноничности)

$$u_p^2 + v_p^2 = 1$$

обеспечивает выполнение всех стандартных для ферми-операторов перестановочных соотношений,

$$[a_{\mathbf{p}\uparrow}^+, a_{\mathbf{p}'\uparrow}]_+ = [a_{\mathbf{p}\downarrow}^+, a_{\mathbf{p}'\downarrow}]_+ = \Delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad [a_{\mathbf{p}\uparrow}^{(+)}, a_{-\mathbf{p}\downarrow}]_+ = 0,$$

а обратное преобразование,

$$\alpha_p = u_p a_{\mathbf{p}\uparrow} - v_p a_{-\mathbf{p}\downarrow}^+, \quad \beta_p = u_p a_{-\mathbf{p}\downarrow} + v_p a_{\mathbf{p}\uparrow}^+$$

показывает, что новые амплитуды перепутывают именно состояния $(\mathbf{p}, \uparrow; -\mathbf{p}, \downarrow)$ исходной модели.

Это преобразование фактически означает выбор нового основного состояния системы, на фоне которого учет уже преобразованной части \mathcal{H}'_1 гамильтониана \mathcal{H}' не будет приводить к появлению тривиальных вкладов. Новые операторы α_p и β_p действуют уже в другом пространстве функций, используемом при введении представления вторичного квантования (см. гл. 1, § 3), каждый базисный вектор которого представляет суперпозицию прежних состояний $(\mathbf{p}, s; -\mathbf{p}, -s)$, построенных в соответствии с процедурой их введения на основе представления о плоских волнах $\varphi_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r})$. Коэффициенты u_p и v_p считаются действительными (они будут определены несколько позже), вместо них можно ввести один параметр (одну функцию) преобразования, положив $u_p = \cos \varphi_p$ и $v_p = \sin \varphi_p$ ($u_p^2 + v_p^2 = 1$), и тогда $(u-v)$ -преобразование представится как бы в виде поворота орт гильбертова пространства на некоторый «угол» φ_p .

Случай, когда один из коэффициентов преобразования равен нулю, например,

$$\begin{aligned} u_p &= 1, & v_p &= 0 & \text{в случае } E_p > \varepsilon_F, \\ u_p &= 0, & v_p &= 1 & \text{в случае } E_p < \varepsilon_F, \end{aligned}$$

соответствует тривиальному преобразованию типа переобозначения операторов, использованному нами в гл. 4, § 3, п. б), когда α_p^+ и β_p^+ представляют операторы рождения ферми-частиц в состояниях (\mathbf{p}, \uparrow) и $(-\mathbf{p}, \downarrow)$ вне сферы Ферми ($p > p_F$), и рождения дырок $(-\mathbf{p}, \downarrow)$ и (\mathbf{p}, \uparrow) внутри заполненной сферы Ферми ($p < p_F$).

Преобразовывая отдельные части оператора \mathcal{H} к новым ферми-операторам, имеем,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_0 &= \sum_{\mathbf{p},s} \varepsilon_p a_{\mathbf{p}s}^+ a_{\mathbf{p}s} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_p [(u_p^2 - v_p^2)(\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + 2u_p v_p (\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p) + 2v_p^2], \\ \mathcal{H}'_1 &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') a_{-\mathbf{p}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}'\uparrow}^+ a_{\mathbf{p}'\uparrow} a_{-\mathbf{p}\downarrow} = \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') [u_p^2 \beta_p^+ \alpha_p^+ - v_p^2 \alpha_p \beta_p + u_p v_p (\beta_p^+ \beta_p + \alpha_p^+ \alpha_p) - u_p v_p] \times \\ &\quad \times [u_{p'}^2 \alpha_{p'} \beta_{p'} - v_{p'}^2 \beta_{p'}^+ \alpha_{p'}^+ + u_{p'} v_{p'} (\alpha_{p'}^+ \alpha_{p'} + \beta_{p'}^+ \beta_{p'}) - u_{p'} v_{p'}]. \end{aligned}$$

Введем оператор

$$\Lambda_p^+ = u_p^2 \beta_p^+ \alpha_p^+ - v_p^2 \alpha_p \beta_p + u_p v_p (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p)$$

и обозначим

$$C(p) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') u_{p'} v_{p'}.$$

Тогда, учитывая, что $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = J(\mathbf{p}', \mathbf{p})$, получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_1 &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') u_p v_p u_{p'} v_{p'} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') u_p v_p \times \\ &\quad \times [(u_{p'}^2 - v_{p'}^2)(\alpha_{p'} \beta_{p'} + \beta_{p'}^+ \alpha_{p'}^+) + 2u_{p'} v_{p'} (\alpha_{p'}^+ \alpha_{p'} + \beta_{p'}^+ \beta_{p'})] - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'} = \end{aligned}$$

$$= - \sum_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} C(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{p}} C(\mathbf{p}) [2u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} (\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}) - (u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2) (\alpha_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}^+ + \beta_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}})] - \\ - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_{\mathbf{p}}^+ \Lambda_{\mathbf{p}'}$$

Если ввести обозначения

$$U = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} 2v_{\mathbf{p}}^2 - \sum_{\mathbf{p}} C(\mathbf{p}) u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}},$$

$$A(\mathbf{p}) = \varepsilon_{\mathbf{p}} (u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2) + 2u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} C(\mathbf{p}),$$

$$B(\mathbf{p}) = \varepsilon_{\mathbf{p}} 2u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} - (u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2) C(\mathbf{p}),$$

то гамильтониан исследуемой системы $\mathcal{H} = \mathcal{H}' + \mathcal{H}''$ запишется в виде

$$\mathcal{H}' = U + \sum_{\mathbf{p}} [A(\mathbf{p}) (\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}) + B(\mathbf{p}) (\alpha_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}^+ + \beta_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}})] - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_{\mathbf{p}}^+ \Lambda_{\mathbf{p}'},$$

$$\mathcal{H}'' = \mathcal{H} - \mathcal{H}' = - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{1}{2} (\Lambda_{\mathbf{p}}'^+ \Lambda_{\mathbf{p}'}' + \Lambda_{\mathbf{p}}''^+ \Lambda_{\mathbf{p}'}'') - \\ - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}', \mathbf{q} \neq 0} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}) \left[\Lambda_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^+ \Lambda_{\mathbf{p}'\mathbf{q}} + \frac{1}{2} (\Lambda_{\mathbf{p}\mathbf{q}}'^+ \Lambda_{\mathbf{p}'\mathbf{q}}' + \Lambda_{\mathbf{p}\mathbf{q}}''^+ \Lambda_{\mathbf{p}'\mathbf{q}}'') \right],$$

где операторы

$$\Lambda_{\mathbf{p}}'^+ = u_{\mathbf{p}}^2 \alpha_{-\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}}^+ + u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} (\alpha_{-\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}} + \beta_{-\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}}^+) + v_{\mathbf{p}}^2 \beta_{-\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{p}}$$

— комплекс $(-\mathbf{p}, \uparrow; \mathbf{p}, \uparrow)$,

$$\Lambda_{\mathbf{p}}''^+ = u_{\mathbf{p}}^2 \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{-\mathbf{p}}^+ - u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} (\beta_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{-\mathbf{p}} + \alpha_{\mathbf{p}} \beta_{-\mathbf{p}}^+) + v_{\mathbf{p}}^2 \alpha_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p}}$$

— комплекс $(-\mathbf{p}, \downarrow; \mathbf{p}, \downarrow)$,

$$\Lambda_{\mathbf{p}\mathbf{q}}^+ = u_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{p}}^+ - v_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{p}} + u_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{p}}^+$$

— комплекс $(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \downarrow; \mathbf{p}, \uparrow)$ $\mathbf{q} \neq 0$,

$$\Lambda_{\mathbf{p}\mathbf{q}}'^+ = u_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{p}}^+ + v_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} \beta_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{p}} + u_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} \alpha_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} \beta_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{p}}^+$$

— комплекс $(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \uparrow; \mathbf{p}, \uparrow)$,

$$\Lambda_{\mathbf{p}\mathbf{q}}''^+ = u_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^+ \beta_{-\mathbf{p}}^+ + v_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \alpha_{-\mathbf{p}} - u_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} v_{\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^+ \alpha_{-\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \beta_{-\mathbf{p}}^+$$

— комплекс $(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \downarrow; \mathbf{p}, \downarrow)$

в отличие от введенного ранее оператора $\Lambda_{\mathbf{p}}$ не содержат в силу условия $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$ и $\mathbf{q} \neq 0$ диагональных конструкций типа $\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}}$ и $\beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}$. Это означает, что при вычислении средних значений по состояниям «повернутой» идеальной системы, гамильтониан которой $\tilde{\mathcal{H}}_0$ содержит диагональные комбинации новых операторов $\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}}$ и $\beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}$, средние от произведений операторов $\Lambda_{\mathbf{p}}$ с $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$ распадаются на произведения средних,

$$\langle \Lambda_{\mathbf{p}}^+ \Lambda_{\mathbf{p}'} \rangle_0 = \langle \Lambda_{\mathbf{p}}^+ \rangle_0 \cdot \langle \Lambda_{\mathbf{p}'} \rangle_0,$$

а средние от остальных операторов Λ в результате такого усреднения выпадают из рассмотрения.

Наша дальнейшая цель состоит теперь в выработке наиболее целесообразной процедуры расчета коэффициентов $(u-v)$ -преобразования. Из известных эквивалентных методик мы остановимся на той, которая связана с использованием вариационной теоремы Боголюбова.

в) Статистический вариационный принцип Н. Н. Боголюбова

Существует несколько способов получения основной формулы этой вариационной теоремы (см. более подробно т. 2, гл. 3, § 2, п. д)). Мы остановимся здесь на выводе, предложенном самим Боголюбовым (1956), представив его в виде трех этапов.

1. Рассмотрим экспоненциальный оператор $e^{F(\lambda)}$ и выведем правило его дифференцирования по параметру λ . Для этого рассмотрим оператор $e^{F(\lambda)t}$, совпадающий с исходным при $t = 1$, дифференцирование которого по t не составляет проблемы,

$$\frac{d}{dt} e^{F(\lambda)t} = F(\lambda) e^{F(\lambda)t},$$

и, следуя приему, использованному нами в гл. 1, § 2, п. в), подпункт 7, введем оператор $V(t)$ с помощью соотношения

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)t} = e^{F(\lambda)t} V(t); \quad V(0) = 0.$$

Продифференцировав это соотношение по t

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)t} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} F(\lambda) e^{F(\lambda)t} = \frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)t} + F(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)t} = \\ &= \frac{d}{dt} e^{F(\lambda)t} V(t) = F(\lambda) e^{F(\lambda)t} V(t) + e^{F(\lambda)t} \frac{dV(t)}{dt}, \end{aligned}$$

получаем дифференциальное уравнение для оператора $V(t)$, которое тут же решается,

$$\begin{cases} \frac{dV}{dt} = e^{-F(\lambda)t} \frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)t} \\ V|_{t=0} = 0 \end{cases} \mapsto V(t) = \int_0^t e^{-F(\lambda)\tau} \frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)\tau} d\tau,$$

откуда следует необходимая нам формула

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)} = e^{F(\lambda)} \int_0^1 e^{-F(\lambda)\tau} \frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} e^{F(\lambda)\tau} d\tau.$$

2. Положим теперь, что оператор $F(\lambda)$ линейно зависит от λ , т. е.

$$F(\lambda) = A + \lambda B,$$

где $A = A^+$ и $B = B^+$ — самосопряженные операторы. Имеем, совершая циклические перестановки операторов под знаком Sp ,

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \text{Sp} e^{A+\lambda B} = \text{Sp} \frac{\partial}{\partial \lambda} e^{A+\lambda B} = \text{Sp} \left\{ e^{A+\lambda B} \int_0^1 e^{-(A+\lambda B)\tau} B e^{(A+\lambda B)\tau} d\tau \right\} = \text{Sp} \{ B e^{A+\lambda B} \},$$

откуда для второй производной от $\text{Sp} \{e^{A+\lambda B}\}$ по λ получаем

$$\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} \text{Sp} e^{A+\lambda B} = \text{Sp} \left\{ B e^{A+\lambda B} \int_0^1 e^{-(A+\lambda B)\tau} B e^{(A+\lambda B)\tau} d\tau \right\}.$$

Расписав последний шпур в виде суммы, используя собственные функции и значения самосопряженного оператора $F(\lambda) = A + \lambda B$, т. е. положив

$$(A + \lambda B)|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle,$$

легко показать, что эта вторая производная вследствие свойства выпуклости экспоненты, $\frac{e^x - e^y}{(x-y)} \geq 0$, неотрицательна, а так как $f(\lambda) - f(0) - \lambda f'(0) \geq 0$, если только $\frac{\partial^2 f(\lambda)}{\partial \lambda^2} \geq 0$, то мы получаем важное для дальнейшего неравенство

$$\text{Sp} e^{A+\lambda B} \geq \text{Sp} e^A + \lambda \text{Sp} \{B e^A\}.$$

3. Чтобы использовать это соотношение для оценки статистической суммы, положим

$$A = -\frac{H_0}{\theta}, \quad B = -\frac{H_1 - S}{\theta}, \quad \lambda = 1,$$

где $H = H_0 + H_1$ — произвольно разбитый на две части гамильтониан системы, а S — некоторый параметр, величиной которого мы распорядимся позже. Тогда в соответствии с полученным выше неравенством имеем следующую оценку для статистической суммы

$$Z = \text{Sp} e^{-H/\theta} \geq e^{-S/\theta} \left(\text{Sp} e^{-H_0/\theta} - \text{Sp} \left\{ \frac{H_1}{\theta} e^{-H_0/\theta} \right\} + \frac{S}{\theta} \text{Sp} e^{-H_0/\theta} \right),$$

которую можно сразу улучшить, выбрав параметр S из условия максимума правой части неравенства. Это дает

$$S = \frac{\text{Sp} \{H_1 e^{-H_0/\theta}\}}{\text{Sp} e^{-H_0/\theta}},$$

и мы получаем основную формулу вариационного принципа для оценки свободной энергии системы $\mathcal{F} = -\theta \ln Z$ сверху

$$\mathcal{F} = -\theta \ln \text{Sp} e^{-H/\theta} \leq \Psi = -\theta \ln \text{Sp} e^{-H_0/\theta} + \frac{\text{Sp} \{H_1 e^{-H_0/\theta}\}}{\text{Sp} e^{-H_0/\theta}}.$$

Чтобы полученная оценка свободной энергии была не только символической, но и эффективной, необходимо прежде всего так выбрать операторную структуру H_0 , чтобы расчеты величин $\text{Sp} e^{-H_0/\theta}$ и средних значений $\langle H - H_0 \rangle_0 = \langle H_1 \rangle_0$ не превращались бы в невыполнимую с математической точки зрения проблему, а осуществлялись бы точно (т. е. оператор H_0 должен иметь структуру, рассмотренную нами в гл. 4). Далее, так как в разделении гамильтониана исследуемой системы на части H_0 и H_1 может участвовать некоторое число разумно вводимых параметров (в нашем случае — это, конечно, коэффициенты $(u-v)$ -преобразования, другие возможности — см. т. 2, гл. 3, § 2), то наилучшая оценка свободной энергии получится тогда, когда эти параметры будут определяться из условия минимума верхней ее границы, причем, условие $\Psi(\theta, V, N; \lambda) = \min$ определит те значения параметров $\lambda = \lambda(\theta, V, N)$, которые с термодинамической точки зрения являются наилучшими.

г) Использование вариационного принципа для определения коэффициентов $(u-v)$ -преобразования

В соответствии со сделанным выше программным указанием выберем в качестве оператора \mathcal{H}_0 ту часть полного гамильтониана \mathcal{H} , которая допускает точное решение, т. е. квадратичную форму по новым операторам $(\alpha - \beta)$, входящим в гамильтониан \mathcal{H} ,

$$\mathcal{H}'_0 = U' + \sum_{\mathbf{p}} [A(\mathbf{p})(\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}) + B(\mathbf{p})(\alpha_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}^+ + \beta_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}})]$$

(форму неоператорной части U' , включающей введенное ранее U , уточним несколько позже). Отметим сразу, что как и при рассмотрении аналогичной формы в гл. 4, § 2, п. б) импульсы \mathbf{p} в квадратичной форме оператора \mathcal{H}_0 не перепутаны, что значительно облегчает проблему его диагонализации. Используем для этой цели аналог проведенного нами $(u-v)$ -преобразования — дополнительное $(\lambda-\mu)$ -преобразование от операторов $\alpha_{\mathbf{p}}$ и $\beta_{\mathbf{p}}$ к новым ферми-операторам $a_{\mathbf{p}}$ и $b_{\mathbf{p}}$,

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{p}} &= \lambda_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} - \mu_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^+, & \alpha_{\mathbf{p}}^+ &= \lambda_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+ - \mu_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}, \\ \beta_{\mathbf{p}} &= \lambda_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}} + \mu_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+, & \beta_{\mathbf{p}}^+ &= \lambda_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^+ + \mu_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}, \end{aligned} \quad \lambda_{\mathbf{p}}^2 + \mu_{\mathbf{p}}^2 = 1.$$

Тогда, выписав входящие в \mathcal{H}_0 операторные комбинации,

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}} &= \lambda_{\mathbf{p}}^2 a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} - \mu_{\mathbf{p}}^2 b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}} - \lambda_{\mathbf{p}} \mu_{\mathbf{p}} (a_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}}^+ + b_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}) + \mu_{\mathbf{p}}^2 \\ \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}} &= \lambda_{\mathbf{p}}^2 b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}} - \mu_{\mathbf{p}}^2 a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} + \lambda_{\mathbf{p}} \mu_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}^+ + a_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}) + \mu_{\mathbf{p}}^2 \\ \alpha_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}^+ &= \lambda_{\mathbf{p}}^2 a_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}}^+ + \lambda_{\mathbf{p}} \mu_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}} + a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}) - \mu_{\mathbf{p}}^2 b_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} - \lambda_{\mathbf{p}} \mu_{\mathbf{p}} \\ \beta_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}} &= \lambda_{\mathbf{p}}^2 b_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}} + \lambda_{\mathbf{p}} \mu_{\mathbf{p}} (b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}} + a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}) - \mu_{\mathbf{p}}^2 a_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}}^+ - \lambda_{\mathbf{p}} \mu_{\mathbf{p}} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \times A(\mathbf{p}) \\ \times B(\mathbf{p}) \end{array} \Bigg\} +$$

и потребовав, чтобы коэффициенты при недиагональной комбинации $(a_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}}^+ + b_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}})$ в операторе \mathcal{H}_0 для всех \mathbf{p} равнялись бы нулю, получаем

$$\mathcal{H}_0 = U' + \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p})(a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} + b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}}),$$

где новый эффективный спектр возбужденных состояний

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = A(\mathbf{p})(\lambda_{\mathbf{p}}^2 - \mu_{\mathbf{p}}^2) + B(\mathbf{p}) \cdot 2\lambda_{\mathbf{p}}\mu_{\mathbf{p}}$$

и энергия основного состояния

$$U' = U + \sum_{\mathbf{p}} [A(\mathbf{p})2\mu_{\mathbf{p}}^2 - B(\mathbf{p}) \cdot 2\lambda_{\mathbf{p}}\mu_{\mathbf{p}}]$$

определяются написанными выше выражениями при выполнении условия

$$0 = A(\mathbf{p}) \cdot 2\lambda_{\mathbf{p}}\mu_{\mathbf{p}} - B(\mathbf{p})(\lambda_{\mathbf{p}}^2 - \mu_{\mathbf{p}}^2),$$

являющегося уравнением для определения коэффициентов $\lambda_{\mathbf{p}}$ и $\mu_{\mathbf{p}}$. Действительно, имеем, опуская общий индекс \mathbf{p} ,

$$\begin{cases} 2\lambda\mu = \frac{B}{A}(\lambda^2 - \mu^2), \\ \lambda^2 + \mu^2 = 1, \end{cases} \quad \mapsto \quad \begin{cases} (\lambda + \mu)^2 = 1 + \frac{B}{A}(\lambda^2 - \mu^2), \\ (\lambda - \mu)^2 = 1 - \frac{B}{A}(\lambda^2 - \mu^2), \end{cases}$$

откуда, после перемножения левых и правых частей, следует

$$(\lambda^2 - \mu^2)^2 = 1 - \frac{B^2}{A^2}(\lambda^2 - \mu^2)^2,$$

и мы получаем

$$\lambda^2 - \mu^2 = \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}}; \quad 2\lambda\mu = \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}}; \quad \lambda^2 = 1 - \mu^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}} \right).$$

Подставляя эти выражения в формулы для $\varepsilon(\mathbf{p})$ и U' , имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{p}) &= \frac{A^2(\mathbf{p})}{\sqrt{A^2(\mathbf{p}) + B^2(\mathbf{p})}} + \frac{B^2(\mathbf{p})}{\sqrt{A^2(\mathbf{p}) + B^2(\mathbf{p})}} = \sqrt{A^2(\mathbf{p}) + B^2(\mathbf{p})}, \\ U' &= U + \sum_{\mathbf{p}} \left(A(\mathbf{p}) \left(1 - \frac{A(\mathbf{p})}{\sqrt{A^2(\mathbf{p}) + B^2(\mathbf{p})}} \right) - \frac{B^2(\mathbf{p})}{\sqrt{A^2(\mathbf{p}) + B^2(\mathbf{p})}} \right) = \\ &= U + \sum_{\mathbf{p}} \left(A(\mathbf{p}) - \sqrt{A^2(\mathbf{p}) + B^2(\mathbf{p})} \right), \end{aligned}$$

или окончательно, учитывая введенные ранее выражения для $A(\mathbf{p})$, $B(\mathbf{p})$ и U и выполняя примитивные арифметические действия:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(\mathbf{p})}, \quad U' = \sum_{\mathbf{p}} (\varepsilon_p + u_p v_p C(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})),$$

где по-прежнему

$$C(\mathbf{p}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') u_{\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'}$$

Несмотря на то, что коэффициенты u_p и v_p пока еще не определены, полученный результат достаточно перспективен. Если $C(\mathbf{p}_F) = 0$ (т. е. $v_p = 0$, $u_p = 1$ или наоборот), то $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_p = \frac{p^2 - p_F^2}{2m}$, $U' = 0$, и реализуется случай нормальной ферми-системы со спектром возбужденных состояний, изображенным на рис. 44. Если же взаимодействие $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ обеспечивает перепутывание электронных состояний (\mathbf{p}, \mathbf{s}) и $(-\mathbf{p}, -\mathbf{s})$ в области, примыкающей к сфере Ферми, то $C(\mathbf{p}_F) \neq 0$, и в спектре $\varepsilon(\mathbf{p})$ появляется энергетическая щель $\varepsilon(\mathbf{p}_F) = |C(\mathbf{p}_F)| = \Delta$ (см. рис. 46), обеспечивающая неразрушающееся токовое состояние электронного газа, т. е. его сверхпроводимость: так как электрон из заполненной сферы Ферми с импульсом $|\mathbf{p}| = p_F - \delta_p \cong p_F$ (самый невыгодный случай), двигаясь со значительной (но меньшей критической $v_0 = C(\mathbf{p}_F)/p_F \sim 10^{-4} p_F/m$) скоростью v и не преодолевая энергетического барьера $2C(\mathbf{p}_F)$ (т. е. не переходя во внешность сферы Ферми), приобретает положительную энергию

$$2C(\mathbf{p}_F) > \varepsilon(\mathbf{p}_F + m\mathbf{v}) \cong \varepsilon(\mathbf{p}_F) + \left(m\mathbf{v} \cdot \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p}_F)}{\partial \mathbf{p}_F} \right) \cong C(\mathbf{p}_F) \pm v p_F > 0,$$

то энергия таких «возбужденных» состояний двигающихся электронов, не переходящих во внешность двигающейся сферы Ферми, будет тоже положительной, т. е. токовое состояние системы будет устойчивым.

Перейдем теперь к расчету средних значений

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}'_0 \rangle = \frac{\text{Sp} \{ (\mathcal{H} - \mathcal{H}'_0) e^{-\mathcal{H}'_0/\theta} \}}{\text{Sp} e^{-\mathcal{H}'_0/\theta}}.$$

Рассмотрим сначала среднее $\langle \Lambda_p^+ \Lambda_{p'} \rangle$. Единственные входящие в эту часть комбинации, которые при условии $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$ будут давать ненулевые вклады — это средние типа $\langle a_{-p}^+ a_p^+ a_{p'} a_{-p'} \rangle$, расчет которых с помощью теоремы о спариваниях дает

$$\langle \overline{a_{-p}^+ a_p^+ a_{p'} a_{-p'}} \rangle = -n_p^2 \Delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}'),$$

и поэтому среднее от этой части оператора $\mathcal{H} - \mathcal{H}'_0$ будет содержать только одно суммирование по импульсу \mathbf{p} ,

$$\left\langle -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'} \right\rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} J(\mathbf{p}, -\mathbf{p}) \langle \Lambda_p^+ \Lambda_{-p} \rangle \sim N^0 = 1,$$

и его можно опустить, так как это среднее не будет иметь необходимого статистического порядка N^1 . В точности то же самое относится и к слагаемому

$$\left\langle -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_p'' \Lambda_{p'}'' \right\rangle \sim N^0 = 1,$$

а средние от комбинаций операторов Λ_{pq} , Λ'_{pq} и Λ''_{pq} в силу условия $\mathbf{q} \neq 0$ вообще будут равняться нулю.

Таким образом, в среднем $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}'_0 \rangle$ остается только одно слагаемое

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}'_0 \rangle = \langle \mathcal{H}' - \mathcal{H}'_0 \rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \langle \Lambda_p^+ \Lambda_{p'} \rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \langle \Lambda_p^+ \rangle \langle \Lambda_{p'} \rangle,$$

которое в силу конструкции \mathcal{H}'_0 , не перепутывающей операторы с разными значениями импульсов, допускает, как мы уже отмечали ранее, расчет средних от каждой комбинации операторов рождения и уничтожения с единым значением \mathbf{p} отдельно от других, характеризуемых другим значением импульса $\mathbf{p}' \neq \mathbf{p}$.

Выразим оператор Λ_p^+ в терминах новых операторов a_p и b_p и сохраним в нем только диагональные конструкции $a_p^+ a_p$ и $b_p^+ b_p$ (остальные в результате усреднения дадут нули). Имеем,

$$\begin{aligned} (\Lambda_p^+)_{\text{диаг}} &= [u_p^2 \beta_p^+ \alpha_p^+ - v_p^2 \alpha_p \beta_p + u_p v_p (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p)]_{\text{диаг}} = \\ &= u_p^2 [-\lambda_p \mu_p (b_p^+ b_p + a_p^+ a_p) + \lambda_p \mu_p] - v_p^2 [-\lambda_p \mu_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) + \lambda_p \mu_p] + \\ &+ u_p v_p [(\lambda_p^2 - \mu_p^2) (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) + 2\mu_p^2] = 2u_p v_p \mu_p^2 + (u_p^2 - v_p^2) \lambda_p \mu_p + \\ &+ [u_p v_p (\lambda_p^2 - \mu_p^2) - (u_p^2 - v_p^2) \lambda_p \mu_p] (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p). \end{aligned}$$

Расчет средних значений от фермиевских чисел заполнения $a_p^+ a_p = N_p = 0; 1$ и $b_p^+ b_p = M_p = 0; 1$ приведет к появлению соответствующих ферми-распределений и логарифмов от них, что в дальнейшем потребует дополнительных преобразований

получающихся результатов. Чтобы этого не случилось, преобразуем двоичную систему $(0; 1)$, введя изинговские символы $\sigma_p = \pm 1$ и $\tau_p = \pm 1$, положив

$$2a_p^+ a_p - 1 = \sigma_p, \quad 2b_p^+ b_p - 1 = \tau_p, \quad a_p^+ a_p + b_p^+ b_p = 1 - \frac{\sigma_p + \tau_p}{2}.$$

Тогда нулевой гамильтониан приобретет вид

$$\mathcal{H}'_0 = U'' - \sum_p \varepsilon(p) \frac{1}{2} (\sigma_p + \tau_p),$$

где

$$U'' = U' + \sum_p \varepsilon(p) = \sum_p (\varepsilon_p + u_p v_p C(p)).$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned} \lambda_p^2 - \mu_p^2 &= \frac{A(p)}{\varepsilon(p)} = \frac{1}{\varepsilon(p)} [(u_p^2 - v_p^2) \varepsilon_p + 2u_p v_p C(p)], \\ 2\lambda_p \mu_p &= \frac{B(p)}{\varepsilon(p)} = \frac{1}{\varepsilon(p)} [2u_p v_p \varepsilon_p - (u_p^2 - v_p^2) C(p)], \end{aligned}$$

получаем для $(\Lambda_p^+)_{\text{диаг}}$ в $(\sigma\text{-}\tau)$ -операторах довольно компактное выражение

$$\begin{aligned} (\Lambda_p^+)_{\text{диаг}} &= u_p v_p - \frac{1}{2} [2u_p v_p (\lambda_p^2 - \mu_p^2) - (u_p^2 - v_p^2) 2\lambda_p \mu_p] \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} = \\ &= u_p v_p - \frac{1}{2\varepsilon(p)} C(p) (u_p^2 + v_p^2) \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} = u_p v_p - \frac{C(p)}{2\varepsilon(p)} \frac{\sigma_p + \tau_p}{2}. \end{aligned}$$

Так как в гамильтониан $\mathcal{H}'_1 = \mathcal{H}' - \mathcal{H}'_0$ входит произведение $\Lambda_p^+ \Lambda_p$, то дальнейшее рассмотрение удивительным образом напоминает соответствующее исследование изинговской системы (см. т. 2, гл. 3, § 2, п. д).

Имеем для «нулевого» термодинамического потенциала

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= -\theta \ln \text{Sp} e^{-\mathcal{H}'_0/\theta} = U'' - \theta \ln \sum_{\{\sigma_p, \tau_p\}} \exp \left\{ \frac{1}{2\theta} \sum_p \varepsilon(p) (\sigma_p + \tau_p) \right\} = \\ &= \sum_p (\varepsilon_p + u_p v_p C(p)) - 2\theta \sum_p \ln 2 \text{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta}, \end{aligned}$$

а так как

$$\langle \sigma_p \rangle = \langle \tau_p \rangle = \frac{\sum_{\sigma_p = \pm 1} \sigma_p e^{(\varepsilon(p)/(2\theta))\sigma_p}}{\sum_{\sigma_p = \pm 1} e^{(\varepsilon(p)/(2\theta))\sigma_p}} = \text{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} = \left\langle \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right\rangle,$$

то

$$\langle \Lambda_p^{(+)} \rangle = u_p v_p - \frac{C(p)}{2\varepsilon(p)} \text{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta},$$

и мы получаем в соответствии с вариационной теоремой Боголюбова

$$\begin{aligned}\Omega \leq \Psi &= \Omega_0 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \langle \Lambda_{\mathbf{p}}^{(+)} \rangle \langle \Lambda_{\mathbf{p}'} \rangle = \\ &= \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} - 2\theta \sum_{\mathbf{p}} \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} + \sum_{\mathbf{p}} \frac{C^2(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} - \\ &\quad - \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{C(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} \cdot \frac{C(\mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}')} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p}')}{2\theta}.\end{aligned}$$

Интересно отметить, что в это выражение для Ψ коэффициенты ($u-v$)-преобразования входят только в комбинации, определяющей величину энергетической щели $C(\mathbf{p})$. Именно она и будет той варьируемой величиной, которая определяет минимальное значение оценки термодинамического потенциала Ω сверху. Для будущего заметим также, что расходимость суммы $\sum \varepsilon(\mathbf{p})$ фиктивна, так как

$$\sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} - 2\theta \sum_{\mathbf{p}} \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} = \sum_{\mathbf{p}} \left(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})} \right) - 2\theta \sum_{\mathbf{p}} \ln (1 + e^{-\varepsilon(\mathbf{p})/\theta}).$$

Если учесть, что

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial C(\mathbf{p})} = \frac{\partial \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})}}{\partial C(\mathbf{p})} = \frac{C(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})},$$

то уравнение минимизации функционала $\Psi(\theta, V, N; C(\mathbf{p}))$

$$\frac{\delta \Psi(C(\mathbf{p}))}{\delta C(\mathbf{p})} = 0,$$

определяющее наилучшую с термодинамической точки зрения величину энергетической щели $C(\mathbf{p})$,

$$\begin{aligned}0 &= -2\theta \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} \cdot \frac{C(\mathbf{p})}{2\theta \varepsilon(\mathbf{p})} + C(\mathbf{p}) \frac{\partial}{\partial C(\mathbf{p})} \left[\frac{C(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} \right] + \frac{C(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} - \\ &\quad - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{C(\mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}')} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p}')}{2\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial C(\mathbf{p})} \left[\frac{C(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(\mathbf{p})}{2\theta} \right]\end{aligned}$$

приводит к трансцендентному уравнению для величины $C(\mathbf{p})$,

$$C(\mathbf{p}) = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{C(\mathbf{p}')}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}'}^2 + C^2(\mathbf{p}')}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}'}^2 + C^2(\mathbf{p}')}}{2\theta} \quad (*)$$

(в правой части в сумме по \mathbf{p}' нет слагаемого с $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$, что можно учесть, формально положив $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = 0$). Вторая вариация Ψ по величине $C(\mathbf{p})$ при выполнении условия термодинамического равновесия системы по отношению к величине энергетической щели $\frac{\delta \Psi}{\delta C(\mathbf{p})} = 0$, реализуемого решением уравнения (*), как это и должно было быть,

оказывается положительной,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta^2 \Psi}{\delta C(p)^2} \right)^{(*)} &= \frac{\varepsilon_p^2}{\varepsilon^3(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} + \frac{C^2(p)}{2\theta \varepsilon^2(p)} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon(p)}{2\theta}} = \\ &= \frac{C^2(p)}{2\varepsilon^3(p)} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon(p)}{2\theta}} \left\{ \frac{\varepsilon_p^2}{C^2(p)} \operatorname{sh} \frac{\varepsilon(p)}{\theta} + \frac{\varepsilon(p)}{\theta} \right\} > 0, \end{aligned}$$

т. е. решение уравнения (*) определяет минимальное по отношению к величине энергетической щели значение термодинамического потенциала, соответствующее устойчивому термодинамическому состоянию системы. Заметим, что в точке $p = p_F$, когда $\varepsilon_{p_F} = 0$, при $\theta \ll C(p_F)$

$$\left(\frac{\delta^2 \Psi}{\delta C(p)^2} \right)_{p=p_F}^{(*)} = \frac{1}{2\theta} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{C(p_F)}{2\theta}} \cong \frac{2}{\theta} e^{-C(p_F)/\theta},$$

и величина Ψ , соответствующая тривиальному решению уравнения (*) $C(p_F) = 0$, лежит выше значения Ψ , определяемого решением $C(p_F) \neq 0$ (если оно, конечно, существует), т. е. состояние системы с отличной от нуля энергетической щелью оказывается более устойчивым, чем нормальное состояние электронного газа.

Если подставить решение уравнения (*) в выражение для Ψ , то оно заметно упростится и приобретет вид

$$\begin{aligned} \Omega \cong \Psi &= \sum_p \left(\varepsilon_p - \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)} \right) - 2\theta \sum_p \ln \left(1 + e^{-\sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}/\theta} \right) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_p \frac{C^2(p)}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}}{2\theta} \end{aligned}$$

(в этом «подставленном» варианте записи термодинамического потенциала производная $\frac{\partial \Psi}{\partial C(p)}$ уже не равна нулю). Заметим также, что тривиальное решение уравнения (*) $C(p) = 0$ оставляет в этой записи только второе слагаемое, которое в силу $\varepsilon(p) = \varepsilon_p$ соответствует значению $\Omega = \Omega_0$, т. е. «нормальному» состоянию электронного газа, описываемому моделью идеального ферми-газа. Интересно отметить, что величина производной полученного выражения для Ψ по $C^2(p)$ меньше нуля,

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Psi}{\delta C^2(p)} &= \frac{\partial}{\partial C^2(p)} \left\{ -2\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} + \frac{C^2(p)}{2\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \right\} = \\ &= -\frac{C^2(p)}{8\varepsilon^3(p)} \cdot \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon(p)}{2\theta}} \left(\operatorname{sh} \frac{\varepsilon(p)}{\theta} - \frac{\varepsilon(p)}{\theta} \right) < 0, \end{aligned}$$

т. е. величина Ψ при наличии конечного значения $C^2(p) \neq 0$ всегда меньше величины, соответствующей тривиальному решению $C^2(p) = 0$. Если положить $\theta = 0$ (тогда $\Omega_0 = 0$) и разложить $\Psi(C(p))$ в формальный ряд по степеням $C \neq 0$, то получим

$$\Delta \Psi = \Psi(C \neq 0) - \Psi(C = 0) = -\frac{1}{8} \sum_p \frac{C^4(p)}{\varepsilon_p^3} + \dots < 0,$$

что согласуется с предыдущим неравенством и еще раз указывает на то, что при $\theta = 0$ в случае существования нетривиального решения уравнения (*) реализуется именно то состояние электронного газа, которое характеризуется наличием энергетической щели $C(p)$ в спектре его возбужденных состояний.

д) Исследование уравнения (*) для энергетической щели в случае упрощенной модели взаимодействия $J(p, p')$

Выяснив в принципе, какими свойствами будет обладать система, описываемая термодинамическим потенциалом Ψ , в случае существования нетривиального решения уравнения (*) для энергетической щели $C(p)$, заметим сразу, что это уравнение при самых общих предположениях об устройстве функции $J(p, p')$ не решается. Эта математическая трудность, поджидавшая нас с момента исследования эффекта Купера (см. § 1 этой главы) является вновь, и чтобы преодолеть ее и получить необходимую нам оценку величины $C(p)$, воспользуемся, как в § 1, мультипликативной аппроксимацией функции $J(p, p')$,

$$J(p, p') = J\theta(p) \cdot \theta(p'),$$

сосредоточенной и имеющей постоянную величину в энергетическом слое ширины ω около ферми-уровня ε_F ,

$$\theta(p) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega. \end{cases}$$

Эта модель, предложенная авторами теории БКШ, является в нашем исследовании последним этапом моделирования эффективного взаимодействия $\nu(p, p', q)$. Несмотря на то, что она учитывает все физические предположения, сформулированные нами в § 1, в формальном отношении будучи разрывной она, конечно, очень груба, приводит к нарушению гладкости функции $\varepsilon(p)$, определяющей зависимость энергии электронных возбуждений от импульса (см. рис. 51) и так далее, но зато позволяет достаточно просто преодолеть все математические трудности и довести предпринятое нами исследование проблемы сверхпроводимости до логического конца. (Заметим, что термодинамические характеристики вырожденного электронного газа с феноменологически заданным щелевым спектром возбужденных состояний легко рассчитываются стандартными методами, см. т. 2, гл. 3., задачу 11.)

Подставляя БКШ-аппроксимацию для $J(p, p')$ в уравнение (*), получаем

$$C(p) = \frac{J}{2V} \theta(p) \sum_{p'} \theta(p') \frac{C(p')}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + C^2(p')}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + C^2(p')}}{2\theta},$$

откуда следует, что

$$C(p) = \begin{cases} \Delta(\theta) & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega, \end{cases}$$

и уравнение для нетривиального решения $\Delta(\theta)$ приобретает вид

$$1 = \frac{J}{2V} \sum_p \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}.$$

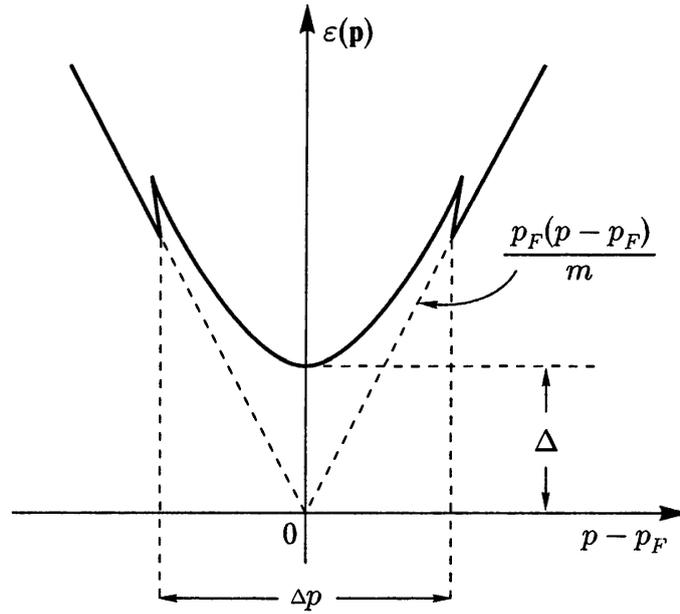


Рис. 51. Поведение спектра возбужденных состояний электронов $\varepsilon(\mathbf{p})$ вблизи границы Ферми согласно БКШ-аппроксимации их взаимодействия; в окрестности $p = p_F$ $\varepsilon(p) = \Delta + (p - p_F)^2/2M$, где $M = m\Delta/(2\varepsilon_F) = m\Delta p/p_F \ll m$ — эффективная масса

Переходя как и в § 1 от суммирования по импульсу \mathbf{p} к интегрированию по величине $\varepsilon_p = \xi = \frac{p^2}{2m} - \varepsilon_F$ и обозначая

$$\rho = \left(J \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p^2}{\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p}} \right)_{p=p_F} = \text{const} > 0,$$

приходим к окончательному виду упрощенного уравнения для зависящей от температуры энергетической щели $\Delta = \Delta(\theta)$

$$1 = \rho \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \text{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\theta} d\xi, \quad (*)$$

где ω — энергетическая граница учтенной во взаимодействии $\nu(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q})$ длинноволновой, т. е. только фононной части передающих взаимодействие от электрона к электрону колебаний решетки (т. е. $\omega < \omega_D$).

Термодинамический потенциал Ψ в этой аппроксимации приобретает вид

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \varepsilon_p - \sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} - 2\theta \ln \left(1 + e^{-\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}/\theta} \right) \right\} + \frac{V}{J} \Delta^2 = \\ &= \rho \frac{V}{J} 2 \int_0^\omega \left\{ \xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} - 2\theta \ln \left(1 + e^{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}/\theta} \right) \right\} d\xi + \frac{V}{J} \Delta^2. \end{aligned}$$

Интересно отметить, что в этом варианте теории

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \frac{J}{2V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \text{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right) = 0$$

и термодинамический потенциал Ψ обладает экстремальным свойством по отношению к величине Δ^2 .

Приступая к рассмотрению уравнения (*'), заметим, что оно тоже в полном объеме точно не решается, поэтому мы рассмотрим последовательно ряд частных случаев, когда его исследование не требует особых затрат.

1. Случай $\theta = 0$. Если в уравнении

$$1 = \rho \int_0^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}} d\xi$$

сделать замену переменной интегрирования $\xi = \Delta_0 x$, то

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^{\omega/\Delta_0} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 1}} = \operatorname{arcsch} \frac{\omega}{\Delta_0},$$

и мы получаем в пределе слабой связи

$$\Delta_0 = 2\omega \frac{1}{e^{1/\rho} - e^{-1/\rho}} \cong 2\omega e^{-1/\rho},$$

т. е. именно тот результат, который в соответствии с предварительным обсуждением нами и ожидался (см. § 1).

2. Случай $\theta \ll \Delta_0$. Полагая

$$\operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\theta} = 1 - 2e^{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}/\theta} + \dots,$$

получаем согласно (*') приближенное уравнение

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^{\omega} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \delta = \operatorname{arcsch} \frac{\omega}{\Delta} - \delta,$$

где, заменяя в поправочном члене величину $\Delta = \Delta(\theta)$ на $\Delta_0 = \Delta(0)$ и учитывая, что в области $\xi \cong 0$

$$\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}}{\theta} = \frac{\Delta_0}{\theta} + \frac{1}{2} \frac{\xi^2}{\Delta_0 \theta} + \dots,$$

имеем, используя методику расчета асимптотики с помощью метода перевала (см. например т. 2, гл. 1, задачу 3) в пределе $\Delta_0/\theta \gg 1$

$$\delta = 2 \int_0^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} e^{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}/\theta} d\xi \cong e^{-\Delta_0/\theta} \int_{-\omega}^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\xi^2}{\Delta_0 \theta}} d\xi \cong \frac{\sqrt{2\pi \Delta_0 \theta}}{\Delta_0} e^{-\Delta_0/\theta},$$

откуда следует низкотемпературное поведение энергетической щели Δ

$$\Delta = 2\omega \frac{1}{e^{1/\rho + \delta} - e^{-1/\rho - \delta}} \cong 2\omega e^{-1/\rho} e^{-\delta} \cong \Delta_0 - \sqrt{2\pi \Delta_0 \theta} e^{-\Delta_0/\theta}.$$

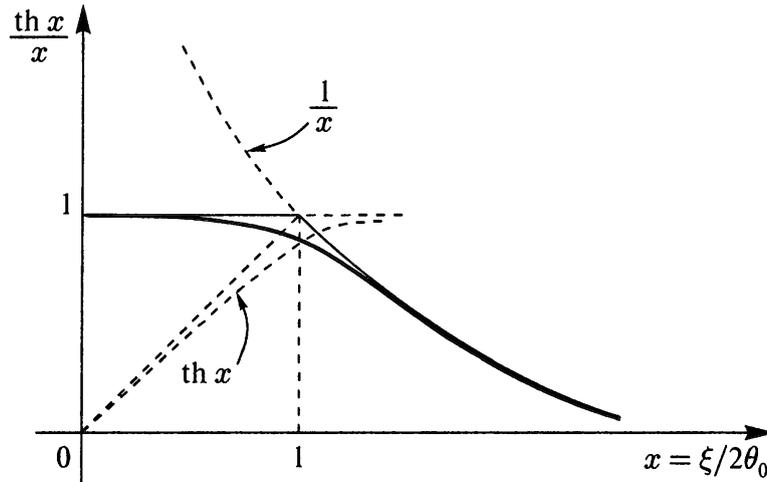


Рис. 52. График подынтегральной функции $\text{th } x/x$, определяющей величину θ_0 (толстая линия) и ее аппроксимация в интервалах $0 < x < 1$ и $1 < x < \infty$ (тонкие линии)

3. Случай $\Delta(\theta_0) = 0$. Уравнение для критической температуры θ_0 согласно (*) имеет вид

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^{\omega} \frac{1}{\xi} \text{th} \frac{\xi}{2\theta_0} d\xi = \int_0^{\omega/(2\theta_0)} \frac{\text{th } x}{x} dx.$$

Так как аналитическими методами этот интеграл не берется, произведем в соответствии с рис. 52 его грубую оценку сверху.

Имеем, разбивая интеграл на два участка,

$$\frac{1}{\rho} \lesssim \int_0^1 dx + \int_1^{\omega/(2\theta_0)} \frac{1}{x} dx = 1 + \ln \frac{\omega}{2\theta_0} = \ln \frac{e\omega}{2\theta_0},$$

откуда, подставляя значение $e \cong 2,718$, получаем

$$\theta_0 \lesssim \frac{e}{2} \omega e^{-1/\rho} \cong 1,26 \omega e^{-1/\rho}.$$

Численный расчет интеграла определяет температуру фазового перехода в нормальное состояние (температуру исчезновения энергетической щели и явления сверхпроводимости) как

$$\theta_0 \cong 1,13 \omega e^{-1/\rho} \cong 0,565 \Delta_0,$$

что на 10 % с небольшим меньше полученной нами грубой оценки.

4. Случай $\delta\theta/\theta_0 = (\theta_0 - \theta)/\theta_0 \ll 1$. В этом случае $\Delta/\theta_0 \ll 1$, и поэтому, разлагая подынтегральное выражение в уравнении (*)

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \text{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2(\theta_0 + \delta\theta)} d\xi$$

по величинам $\delta\theta$ и Δ^2 и переходя к интегрированию по безразмерной переменной $x = \xi/(2\theta_0)$, получаем в первом порядке

$$\frac{\delta\theta}{\theta_0} \int_0^{\omega/(2\theta_0)} \frac{1}{\text{ch}^2 x} dx = \frac{\Delta^2}{8\theta_0^2} \int_0^{\omega/(2\theta_0)} \left(\frac{\text{th} x}{x^3} - \frac{1}{x^2 \text{ch}^2 x} dx \right) \quad \text{или} \quad \frac{\delta\theta}{\theta_0} A = \frac{\Delta^2}{8\theta_0^2} B.$$

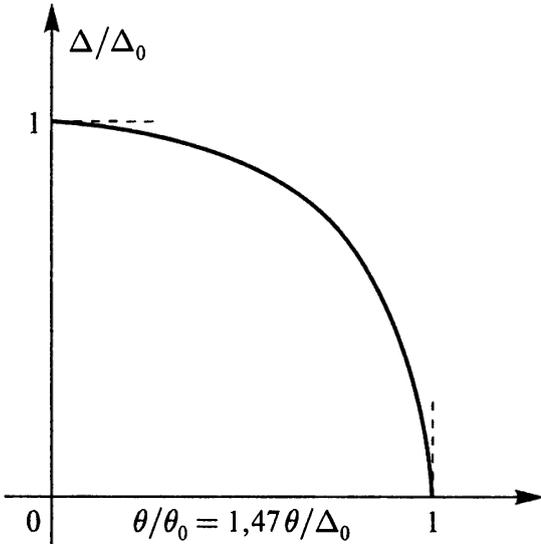


Рис. 53. Общий вид температурной зависимости энергетической щели Δ в спектре элементарных возбуждений электронного газа в металлах

Интегралы A и B сходятся, и их верхние пределы $\omega/(2\theta_0) \sim e^{1/\rho} \gg 1$ можно заменить на $+\infty$. Тогда, осуществляя численный расчет интеграла B (самая грубая его оценка, проведенная в духе рис. 52, дает величину $B \lesssim 2/3$), получаем

$$\Delta^2 = \frac{A}{B} \cdot 8\theta_0 \delta\theta \cong 9,39\theta_0 \delta\theta,$$

откуда

$$\Delta \cong 3,064\theta_0 \sqrt{\frac{\theta_0 - \theta}{\theta_0}}$$

или

$$\frac{\Delta}{\Delta_0} \cong 1,73 \sqrt{\frac{\theta_0 - \theta}{\theta_0}}.$$

Общий вид температурной зависимости величины Δ , представленный на рис. 53, откровенно напоминает температурную зависимость параметра дальнего порядка (спонтанной намагниченности) в системах, допускающих приближение молекулярного поля, в которых точка $\theta = \theta_0$ также является температурой фазового перехода 2-го рода (см. т. 1, задачу 63; т. 2, гл. 3, § 2, п. д) и задачи 29 и 38).

е) Термодинамические свойства модельного сверхпроводника

Дифференцируя полученное в п. д) выражение для термодинамического потенциала Ψ по температуре и учитывая, что $\frac{\partial \Psi}{\partial \Delta^2} = 0$, получаем для энтропии системы

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} = \sum_p \frac{\partial}{\partial \theta} 2\theta \ln 2 \text{ch} \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} = \\ &= \sum_p \left\{ 2 \ln 2 \text{ch} \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} - 2 \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \text{th} \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right\}, \end{aligned}$$

откуда для теплоемкости при постоянном объеме следует

$$C = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} = 2\theta \sum_p \left\{ -\frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \right\} \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}.$$

Так как

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} = -\frac{1}{2\theta^2} \sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2} + \frac{1}{2\theta} \frac{1}{2\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}} \frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta},$$

то получаем окончательно

$$\begin{aligned} C &= \sum_p \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \left\{ \frac{\epsilon_p^2 + \Delta^2}{2\theta^2} - \frac{1}{4\theta} \frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \right\} = \\ &= \frac{\rho V}{J} 2 \int_0^{\omega} \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \left\{ \frac{\xi^2 + \Delta^2}{2\theta^2} - \frac{1}{4\theta} \frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \right\} d\xi. \end{aligned}$$

Используя полученные в пункте д) частные результаты для величины Δ^2 в области низких температур $\theta \ll \Delta_0$ и в области, прилегающей к температуре исчезновения энергетической щели $\Delta(\theta_0) = 0$, когда $(\theta_0 - \theta)/\theta_0 \ll 1$, исследуем поведение теплоемкости в этих же крайних случаях.

Случай $\theta \ll \Delta$. Учитывая, что в области, прилегающей к поверхности Ферми $|p - p_F| < \Delta p$, можно положить

$$\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2} = \Delta \left(1 + \frac{\epsilon_p^2}{\Delta^2} \right)^{1/2} \cong \Delta + \frac{1}{2} \frac{p_F^2 (p - p_F)^2}{\Delta m} = \Delta + \frac{(p - p_F)^2}{2M} = \Delta + \frac{P^2}{2M},$$

где «эффективная» масса, характеризующая крутизну параболы исходящей из точки $p = p_F$ (см. рис. 51),

$$M = m \frac{\Delta}{2\epsilon_F} = m \frac{\Delta p}{p_F} \cong 10^{-4} m,$$

имеем разумную аппроксимацию первого множителя подынтегрального выражения в формуле для теплоемкости C

$$\frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \cong 4e^{-\Delta/\theta} \cdot e^{-P^2/(2M\theta)}.$$

Так как второе слагаемое в фигурных скобках в этом же интеграле содержит величину

$$-\frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \cong \frac{1}{\pi} \Delta_0 \left(\frac{2\pi \Delta_0}{\theta} \right)^{3/2} e^{-\Delta_0/\theta},$$

т. е. еще одну экспоненту $e^{-\Delta/\theta} \ll 1$, то его при проведении основной оценки можно опустить. Это же относится и к учету температурной зависимости самой щели

$$\Delta = \Delta_0 - \sqrt{2\pi \Delta_0 \theta} e^{-\Delta_0/\theta} \cong \Delta_0.$$

Далее, усреднение величины $\epsilon_p^2 + \Delta^2$ по квазимаксвелловскому распределению по величине P дает

$$\overline{\epsilon_p^2 + \Delta^2} = \Delta^2 + 2\Delta \frac{\overline{P^2}}{2M} = \Delta^2 \left(1 + \frac{\theta}{\Delta} \right) \cong \Delta^2 \cong \Delta_0^2,$$

и мы получаем для теплоемкости системы в области $\theta \ll \Delta_0$

$$C = \sum_p 4 \frac{\Delta_0^2}{2\theta^2} e^{-\Delta_0/\theta} e^{-P^2/(2M\theta)} \left(1 + O\left(\frac{\theta}{\Delta_0}\right) + e^{-\Delta_0/\theta} P\left(\frac{\theta}{\Delta_0}\right) \right) \cong$$

$$\cong \frac{4\pi p_F^2 V}{(2\pi\hbar)^3} 4 \frac{\Delta_0^2}{2\theta^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-P^2/(2M\theta)} dP e^{-\Delta_0/\theta} = N 3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\theta}{\varepsilon_F} \left(\frac{\Delta_0}{\theta}\right)^{5/2} e^{-\Delta_0/\theta},$$

где мы учли, что $V = N\hbar^3 3\pi^2/p_F^3$, и в силу $M/m \cong 10^{-4}$ расширили область интегрирования по величине P , $-\Delta p < P = (p - p_F) < +\Delta p$ на весь интервал от $-\infty$ до $+\infty$. Этот характерный результат для систем, в которых энергии возбужденных состояний отделены от энергии основного состояния энергетической щелью, и содержащий экспоненту $e^{-\Delta/\theta} \ll 1$, полностью совпадает с решением задачи, данной в т. 2, гл. 2 (задача 11).

Случай $\theta = \theta_0$, $\Delta(\theta_0) = 0$. Полагая

$$\frac{\rho V}{J} = N \frac{3}{4} \frac{1}{\varepsilon_F}; \quad \frac{1}{4\theta_0} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \right)_{\theta=\theta_0} = -\frac{9,39\theta_0}{4\theta_0} = -2,3475,$$

имеем

$$C(\theta_0) = N \frac{3}{4} \frac{1}{\varepsilon_F} 2 \int_0^{\omega} \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\xi}{2\theta_0}} \left(\frac{\xi^2}{2\theta_0^2} + 2,3475 \right) d\xi = N \frac{3\theta_0}{\varepsilon_F} \int_0^{\omega/(2\theta_0)} \frac{2x^2 + 2,3475}{\text{ch}^2 x} dx.$$

Замечая, что

$$\frac{\omega}{2\theta_0} = \frac{\omega}{2 \cdot 0,565\Delta_0} \cong \frac{1}{2} e^{1/\rho} \gg 1,$$

мы можем в интеграле по величине $x = \xi/2\theta_0$ заменить верхний предел на $+\infty$. Учтем численные значения определенных интегралов

$$A_1 = \int_0^{\infty} \frac{1}{\text{ch}^2 x} dx = \text{th } x \Big|_{x=0}^{x=+\infty} = 1;$$

$$A_2 = \int_0^{\infty} \frac{x^2}{\text{ch}^2 x} dx = \frac{\pi^2}{2} |B_2| = \frac{\pi^2}{12} = 0,8225.$$

Оценка величины интеграла A_2 сверху достаточно проста: так как $\text{ch } x > \frac{1}{2} e^x$, то

$$A_2 < \int_0^{\infty} x^2 4e^{-2x} dx = 1.$$

Тогда, отнеся величину теплоемкости сверхпроводника слева от точки θ_0 к теплоемкости идеального ферми-газа при температуре справа от θ_0 ,

$$C_{\text{ид}} = N \frac{\pi^2}{2} \frac{\theta_0}{\varepsilon_F},$$

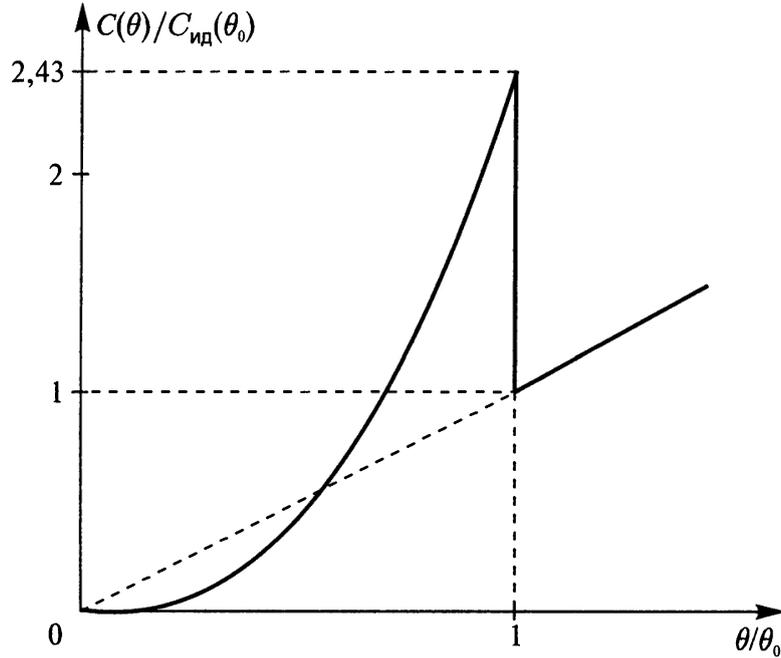


Рис. 54. Температурное поведение теплоемкости модельного сверхпроводника, отнесенной к теплоемкости идеального ферми-газа в точке фазового перехода $\theta = \theta_0$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{C(\theta_0)}{C_{\text{ид}}(\theta_0)} &= \frac{6}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{2x^2 + 2,3475}{\text{ch}^2 x} dx = \frac{6 \cdot 2,3475}{\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{\text{ch}^2 x} (1 + 0,85x^2) dx = \\ &= 1,428(A_1 + 0,85A_2) = 1,428 \cdot 1,699 = 2,426 \cong 2,43 \end{aligned}$$

(грубая оценка табличного интеграла A_2 дает $C(\theta_0)/C_{\text{ид}}(\theta_0) \cong 2,64$, т. е. ошибку в 8,7 %).

Таким образом, при достижении температуры θ_0 в системе происходит фазовый переход 2-го рода по эренфестовской классификации (см. т. 1, § 6, п. ж)) из сверхпроводящего в нормальное состояние электронного газа с конечным скачком теплоемкости $\Delta C/C_{\text{ид}} = 1,43$. График температурной зависимости величины $C(\theta_0)/C_{\text{ид}}(\theta_0)$ представлен на рис. 54.

§ 3. Обсуждение

а) Теплоемкость сверхпроводников

Исследуя упрощенную изотропную модель сверхпроводника, мы получили некоторое усредненное значение энергетической щели $\Delta(\theta)$, определяющей уже потом как бы в общих чертах характерные особенности всех сверхпроводящих систем (то же самое можно, к примеру, сказать и об универсальной в упомянутом выше смысле теории теплоемкости твердых тел по Дебаю). На эксперименте же как в низкотемпературной области, так и в момент перехода из сверхпроводящего в нормальное состояние проявляется минимальное значение энергетической щели, так что теоретические результаты для теплоемкости и других величин, пропорциональных Δ или θ_0 , оказываются несколько завышенными. Но все же, если сопоставить полученную нами на основе использования весьма грубой модели электронного газа в металле

безразмерную оценку скачка теплоемкости $\Delta C/C_{\text{ид}}(\theta_0)$ с экспериментальными данными, то обнаруживается весьма приятное соответствие этих величин (см. таблицу), что с несомненностью свидетельствует о том, что грубая и откровенно формальная модель БКШ правильно отражает именно тот основной динамический механизм, который приводит к образованию устойчивого сверхпроводящего состояния системы.

	Теор.	Tl	Zn	V	Ta	Al	Sn	Nb	Hg	Pb
$C(\theta_0)/C_{\text{ид}}(\theta_0)$	2,43	2,15	2,25	2,57	2,58	2,60	2,60	3,07	3,18	3,65

б) Величина критического магнитного поля

Согласно термодинамической теории фазового перехода металла из нормального в сверхпроводящее состояние (см. т. 1, задачу 60), исходящей из феноменологического учета эффекта Мейсснера и предположения, основанного на аппроксимации экспериментальных данных о температурной зависимости критического магнитного поля

$$H_{\text{кр}}(\theta) = H_0 \left(1 - \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^2 \right),$$

справедливой в основном в области $\theta \lesssim \theta_0$, в случае отсутствия внешнего магнитного поля $H = 0$ при температуре $\theta = \theta_0$ происходит фазовый переход второго рода, характеризуемый скачком теплоемкости (в расчете на 1 см³ системы)

$$C_{\text{сверх.}} - C_{\text{норм.}} = \Delta C = \frac{\theta_0}{4\pi} \left(\frac{\partial H_{\text{кр}}(\theta)}{\partial \theta} \right)_{\theta=\theta_0}^2,$$

где величина $H_{\text{кр}}(\theta)$ связана со скачком термодинамического потенциала единицы объема системы соотношением

$$\frac{H_{\text{кр}}^2(\theta)}{8\pi} = \frac{1}{V} (\Psi_{\text{ид}} - \Psi) = -\frac{1}{V} \Delta\Psi.$$

Представим величину $\Delta\Psi = \Psi(\theta, V, N|\Delta^2) - \Psi(\theta, V, N|0)$ в виде разложения в ряд по степеням Δ^2 . Чтобы в коэффициентах этого разложения величины θ и Δ^2 (напомним, что во всех наших формулах $\Delta^2 = \Delta^2(\theta)$) были бы согласованы друг с другом по температуре, будем разлагать в ряд не $\Psi(\Delta^2)$ в окрестности $\Delta^2 = 0$, а величину $\Psi(\Delta^2 - \Delta^2)$ в окрестности $\Delta^2 \neq 0$. Тогда

$$\begin{aligned} \Delta\Psi &= \Psi(\Delta^2) - \Psi(\Delta^2 - \Delta^2) = \Psi(\Delta^2) - \left(\Psi(\Delta^2) - \frac{\partial\Psi(\Delta^2)}{\partial\Delta^2} \Delta^2 + \frac{\partial^2\Psi(\Delta^2)}{(\partial\Delta^2)^2} \frac{\Delta^4}{2} + \dots \right) = \\ &= \frac{\partial\Psi(\Delta^2)}{\partial\Delta^2} \Delta^2 - \frac{\partial^2\Psi(\Delta^2)}{(\partial\Delta^2)^2} \frac{\Delta^4}{2} + \dots \end{aligned}$$

Далее имеем

$$\frac{\partial\Psi(\Delta^2)}{\partial\Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \frac{J}{2V} \sum_p \frac{\text{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \right) = 0,$$

и вклад, пропорциональный Δ^2 в выражении для $\Delta\Psi$, в силу уравнения для энергетической щели $\Delta(\theta)$ (см. § 2, п. д)) пропадает,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{(\partial \Delta^2)^2} &= -\frac{1}{2} \sum_p \frac{\partial}{\partial \Delta^2} \frac{\text{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} = \\ &= \frac{1}{4} \sum_p \left\{ \left(\frac{1}{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} \right)^{3/2} \text{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} - \frac{1}{2\theta} \frac{1}{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} \cdot \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \right\}, \end{aligned}$$

и мы получаем, сохраняя только низший, четвертый порядок по Δ в выражении для $\Delta\Psi$, что

$$\begin{aligned} \Delta\Psi &= -\frac{\partial^2 \Psi(\Delta^2)}{(\partial \Delta^2)^2} \frac{\Delta^4}{2} + \dots = -\left(\frac{\partial^2 \Psi(\Delta^2)}{(\partial \Delta^2)^2} \right)_{\Delta^2=0} \cdot \frac{\Delta^4}{2} + \dots \cong \\ &\cong -\sum_p \left\{ \frac{1}{\varepsilon_p^3} \text{th} \frac{\varepsilon_p}{2\theta} - \frac{1}{2\theta \varepsilon_p^2} \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\varepsilon_p}{2\theta}} \right\} \frac{\Delta^4}{2}. \end{aligned}$$

Переходя к интегрированию по величине $\xi = \varepsilon_p$, учитывая, что

$$\frac{\rho V}{J} = \frac{V m p_F}{2\pi^2 \hbar},$$

и вводя безразмерную переменную интегрирования $x = \xi/(2\theta)$, получаем

$$\begin{aligned} -\frac{1}{V} \Delta\Psi &= \frac{\rho}{J} 2 \int_0^{\omega} \left\{ \frac{1}{\xi^3} \text{th} \frac{\xi}{2\theta} - \frac{1}{2\theta \xi^2} \frac{1}{\text{ch}^2 \frac{\xi}{2\theta}} \right\} d\xi \cdot \frac{\Delta^4}{8} = \\ &= \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{4\theta^2} \int_0^{\omega/(2\theta)} \left(\frac{1}{x^3} \text{th} x - \frac{1}{x^2} \frac{1}{\text{ch}^2 x} \right) dx \cdot \frac{\Delta^4}{8}. \end{aligned}$$

Интеграл по переменной x нам знаком (см. § 2 этой главы, п. д)). Он равен $B \cong 0,85$. Учитывая, что

$$m p_F = \frac{p_F^3}{2\varepsilon_F} = \frac{\hbar^3 3\pi^2 n}{2\varepsilon_F}, \quad \text{где } n = \frac{N}{V},$$

получаем

$$-\frac{1}{V} \Delta\Psi = \frac{3 \cdot 0,85}{64} n \frac{\Delta^4}{\theta^2 \varepsilon_F} = \frac{H_{\text{кр}}^2(\theta)}{8\pi},$$

откуда для критического магнитного поля будем иметь

$$H_{\text{кр}}(\theta) = \sqrt{8\pi \frac{1,275}{32}} \cdot \sqrt{n} \frac{\Delta^2}{\theta \sqrt{\varepsilon_F}}.$$

Число, стоящее под знаком квадратного корня, удивительным образом оказывается равным 1,00087, что дает нам право заменить весь численный коэффициент на единицу.

Так как в нашем исследовании интерес представляет область $\theta \lesssim \theta_0$, в которой $\Delta^2 = 9,39\theta_0^2(1 - \theta/\theta_0)$, то мы получаем

$$H_{\text{кр}}(\theta) = \sqrt{\frac{n}{\epsilon_F}} 9,39\theta_0 \left(1 - \frac{\theta}{\theta_0}\right)$$

и

$$\left(\frac{\partial H_{\text{кр}}(\theta)}{\partial \theta}\right)_{\theta=\theta_0}^2 \cong 88,2 \frac{n}{\epsilon_F}.$$

Учитывая, что для 1 см^3 нормальной фазы

$$C_{\text{ид}}(\theta_0) = n \frac{\pi^2 \theta_0}{2 \epsilon_F},$$

будем иметь для безразмерной величины скачка теплоемкости, согласно термодинамической теории,

$$\frac{\Delta C}{C_{\text{ид}}}\bigg|_{\theta=\theta_0} \cong \frac{88,2}{2\pi^3} \cong 1,424$$

вместо полученной ранее величины 1,426, что можно отнести за счет погрешностей численного расчета.

Наконец, если представить полученную нами формулу для $H_{\text{кр}}(\theta)$ в области $\theta_0 - \theta \ll \theta_0$ в виде выражения, используемого в феноменологической теории

$$H_{\text{кр}}(\theta) \cong \sqrt{\frac{n}{\epsilon_F}} 9,39 \frac{\theta_0}{2} \left(1 - \left(\frac{\theta}{\theta_0}\right)^2\right),$$

и совершенно неоправданно экстраполировать его на весь интервал $0 < \theta < \theta_0$, то получим, что величина H_0 , стоящая в экспериментальной аппроксимации $H_{\text{кр}}(\theta)$, будет равна

$$H_0 = \sqrt{\frac{n}{\epsilon_F}} 4,695\theta_0 = \sqrt{\frac{n}{\epsilon_F}} 2,652\Delta_0.$$

в) Качественный учет кулоновского взаимодействия

Ввиду того что полный расчет влияния кулоновского отталкивания на существование коррелированных пар $(\mathbf{p}, \uparrow; -\mathbf{p}, \downarrow)$ в энергетическом слое, примыкающем к поверхности Ферми, представляет достаточно сложную задачу, рассмотрим эту проблему на уровне уже использованной нами в § 2, п. д) аппроксимации взаимодействия электронов $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, которая позволила нам с минимальными затратами преодолеть все математические трудности решения уравнения (*) для энергетической щели $C(\mathbf{p})$. Чтобы еще более упростить задачу, рассмотрим случай $\theta = 0$, когда это уравнение приобретает наиболее простой вид

$$C(\mathbf{p}) = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{C(\mathbf{p}')}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{p}'}^2 + C^2(\mathbf{p}')}}.$$

Учтем, что индуцированные колебания решетки притяжение электронов существенно в области $-\omega < \epsilon_{\mathbf{p}} < \omega$ вблизи границы Ферми, где $\omega < \omega_D$, и характеризуется корреляционным радиусом $R_{\text{корр}} \sim 3 \cdot 10^4 \text{ \AA}$, а кулоновское отталкивание,

экранируемое ионным фоном решетки на расстоянии $R_{TF} \sim 1 \text{ \AA}$ — в более широкой области $-\omega_1 < \varepsilon_p < \omega_1$, где согласно оценке, приведенной в § 1 этой главы, ω_1 превышает величину ω в 10^3-10^4 раз. Чтобы решить в этой ситуации уравнение для $C(p)$, используем, как и в § 2, п. д), ступенчатую аппроксимацию функции $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$: введем две θ -функции

$$\theta(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega, \end{cases}$$

$$\theta_1(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } \omega < |\varepsilon_p| < \omega_1, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega_1, \end{cases}$$

две константы, характеризующие притяжение $J > 0$ и отталкивание $(-J_1) < 0$, и положим

$$J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = (J - J_1)\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}') - J_1\theta(\mathbf{p})\theta_1(\mathbf{p}') - J_1\theta_1(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}') - J_1\theta_1(\mathbf{p})\theta_1(\mathbf{p}'),$$

т. е. электроны взаимодействуют с ослабленной кулоновским отталкиванием интенсивностью $J - J_1$, если оба их импульса находятся в зоне электрон-фононного взаимодействия $|\varepsilon_p| < \omega$, а во всех иных случаях отталкиваются с интенсивностью, характеризуемой величиной $-J_1 < 0$. Тогда, выписывая отдельно уравнения для $C(p) = \Delta$ для значений импульса \mathbf{p} , входящих в диапазон $|\varepsilon_p| < \omega$, и для $C(p) = \Delta_1$ для значений \mathbf{p} , попадающих в зону $\omega < |\varepsilon_p| < \omega_1$, получаем два уравнения

$$\begin{cases} \Delta = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} (J - J_1)\theta(\mathbf{p}') \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} J_1\theta_1(\mathbf{p}') \frac{\Delta_1}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta_1^2}}, \\ \Delta_1 = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} J_1\theta(\mathbf{p}') \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} J_1\theta_1(\mathbf{p}') \frac{\Delta_1}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta_1^2}}, \end{cases}$$

или, переходя к интегрированию по величине $\xi = \varepsilon_{p'}$, полагая

$$\rho = \frac{Jmp_F}{(2\pi^2\hbar^3)} \quad \text{и} \quad \rho_1 = \frac{J_1mp_F}{(2\pi^2\hbar^3)},$$

$$\begin{cases} \Delta = (\rho - \rho_1) \int_0^\omega \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \cdot \Delta - \rho_1 \int_\omega^{\omega_1} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_1^2}} \Delta_1, \\ \Delta_1 = -\rho_1 \int_0^\omega \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \cdot \Delta - \rho_1 \int_\omega^{\omega_1} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_1^2}} \Delta_1. \end{cases}$$

Так как

$$\int_a^b \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} = \operatorname{arcsch} \frac{b}{\Delta} - \operatorname{arcsch} \frac{a}{\Delta} = \ln \frac{b + \sqrt{b^2 + \Delta^2}}{a + \sqrt{a^2 + \Delta^2}},$$

то, учитывая, что согласно § 2, п. д) $\sqrt{\omega^2 + \Delta^2} \cong \omega$, можно записать полученную систему нелинейных уравнений в виде

$$\begin{cases} \Delta = (\rho - \rho_1) \ln \frac{2\omega}{\Delta} \cdot \Delta - \rho_1 \ln \frac{\omega_1}{\omega} \cdot \Delta_1, \\ \Delta_1 = -\rho_1 \ln \frac{2\omega}{\Delta} \cdot \Delta - \rho_1 \ln \frac{\omega_1}{\omega} \cdot \Delta_1. \end{cases}$$

Исключая величину Δ_1 из первого уравнения с помощью второго, приходим к уравнению, определяющему величину энергетической щели Δ ,

$$1 = \left(\rho - \frac{\rho_1}{1 + \rho_1 \ln \frac{\omega_1}{\omega}} \right) \ln \frac{2\omega}{\Delta} = \tilde{\rho} \ln \frac{2\omega}{\Delta},$$

по форме полностью совпадающему с полученным нами ранее (но с эффективным значением $\tilde{\rho}$) и имеющему решение только в случае $\tilde{\rho} > 0$. Это неравенство является критерием существования при наличии кулоновского отталкивания щелевого решения

$$\Delta = 2\omega e^{-1/\tilde{\rho}},$$

т. е. сверхпроводящего состояния коррелированных электронных пар.

Интересно отметить, что действующее в более широкой области импульсов кулоновское отталкивание электронов перенормируется вследствие того, что в знаменателе второго, неотрицательного слагаемого в выражении для $\tilde{\rho}$ стоит большая величина $\ln \frac{\omega_1}{\omega}$, поэтому взаимодействие $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ может иметь характер отталкивания во всей области импульсов, т. е. $J - J_1 < 0$, и тем не менее условие $\tilde{\rho} > 0$ может быть соблюдено, и сверхпроводящее состояние может существовать также и в случае преобладания кулоновского взаимодействия над индуцированными колебаниями решетки притяжением.

По той же причине это «дальнодействующее» (в масштабе постоянной решетки $a \sim 1-10 \text{ \AA}$) притяжение электронов, приводящее к образованию «длинноволновых» куперовских пар, подавляет эффект их рассеяния на примесях и дислокациях, в нормальной фазе приводящего к остаточному сопротивлению, в полной аналогии (с точностью до замены длины де-Бройлевской волны $\lambda = \tilde{c}/\omega$, характеризующей состояние коррелированных электронных пар, на длину волны электромагнитного излучения $\lambda = c/\omega$) с классическим диапазоном геометрической оптики, когда длинноволновые (порядка 10^3-10^4 \AA) электромагнитные колебания, взаимодействуя с зеркалами и линзами, не разрушаются молекулярными неровностями полированных поверхностей и внутренними дефектами этих приборов.

г) Вариационное приближение и асимптотическая точность полученных результатов

Полученное нами в § 2, п. г) решение для термодинамического потенциала Ψ системы, характеризуемой гамильтонианом \mathcal{H}' и для уравнения (*), определяющего величину энергетической щели в спектре возбуждений сверхпроводящей системы, является, конечно, лишь вариационным приближением. Если сопоставить это решение с результатами, полученными на основе вариационной обработки трехмерной системы Изинга (см. т. 2, гл. 3, § 2, п. д)), то обращает на себя внимание не только формальное сходство результатов (те же конструкции из логарифма гиперболического косинуса, да и уравнение для параметра дальнего порядка подозрительно походит

на уравнение (*)), возникшее отнюдь не оттого, что вместо чисел заполнения 0 и 1 мы использовали числа ± 1 , а главным образом то обстоятельство, что при расширении радиуса действия узлов изинговской решетки приближение Брега—Вильямса становится все более и более точным. Там же (см. гл. 3, задача 39) мы показали, что уравнение молекулярного поля Вейсса, являющееся вариационным приближением для трехмерной модели ферромагнетика Изинга с взаимодействием ближайших соседей, является асимптотически точным в пределе бесконечного радиуса взаимодействия узлов решетки, и результаты для теплоемкости системы, характеризуемой температурным поведением $2(\theta_0/\theta)^2 e^{-2\theta_0/\theta}$ в области $\theta \ll \theta_0$ и скачком $\Delta C = 3/2$ при температуре $\theta = \theta_0$ в случае отсутствия внешнего магнитного поля, поразительно напоминающие полученные нами в § 2, п. д) аналогичные результаты, являются асимптотически точными.

Аналогичная ситуация имеет место и в теории неидеальных классических газов. Как показали М. Кац и Дж. Уленбек (см. т. 2, гл. 3, задача 23), традиционное уравнение состояния Ван-дер-Ваальса является точным уравнением состояния для одномерной модели упругих шаров со слабым дальнедействующим их притяжением в пределе бесконечного увеличения радиуса взаимодействия $R_0 \rightarrow \infty$ (что, несомненно, добавляет аргументацию в пользу концепции подобия критических явлений и фазовых переходов 2-го рода и λ -типа).

Согласно предварительному рассмотрению (см. § 1) нашей системы корреляционный радиус, характеризующий размер квазисвязанной пары $(\mathbf{p}, \uparrow; -\mathbf{p}, \downarrow)$ в 10^3 раз превышает среднее расстояние между электронами, а значит, и между такими же парами, так что их взаимодействие, характеризуемое величиной $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, хотя и нелокально, но определенно дальнедействующее, и это наводит на мысль, что полученное вариационным методом решение проблемы сверхпроводимости если и не является точным, то в какой-то мере приближается к нему.

Ситуация кардинально меняется, как только мы переходим к использованию БКШ-модели взаимодействия пар $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = J\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}')$: вариационная оценка совпадает с асимптотически точным решением проблемы (в полной аналогии с упомянутой выше задачей об изинговской системе с бесконечнодальнедействием). Продемонстрируем это с помощью непосредственного расчета.

Итак, рассмотрим систему, характеризуемую гамильтонианом

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}'_0 + \mathcal{H}'_1 = U + \sum_{\mathbf{p}} [A(\mathbf{p})(\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}) + B(\mathbf{p})(\alpha_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}^+ + \beta_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}})] - \\ - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_{\mathbf{p}}^+ \Lambda_{\mathbf{p}'},$$

где

$$\Lambda_{\mathbf{p}}^+ = u_{\mathbf{p}}^2 \beta_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}}^+ - v_{\mathbf{p}}^2 \alpha_{\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{p}} + u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} (\beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}} + \alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}}).$$

Приведя с помощью дополнительного линейного $(\lambda-\mu)$ -преобразования оператор \mathcal{H}'_0 к диагональному виду по новым операторам $a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}$ и $b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}}$, мы представили его в § 2 в виде

$$\mathcal{H}'_0 = \sum_{\mathbf{p}} (\epsilon_{\mathbf{p}} + u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} C(\mathbf{p})) - \sum_{\mathbf{p}} \epsilon(\mathbf{p}) \frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2},$$

где по-прежнему

$$C(\mathbf{p}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') u_{\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'}, \quad \epsilon(\mathbf{p}) = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})}.$$

Если мы запишем необходимую нам статистическую сумму в виде бесконечного разложения в терминах термодинамической теории возмущений (см. гл. 1, § 2, п. ж))

$$\frac{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}'/\theta}}{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}'_0/\theta}} = 1 + \sum_{n>1} \int_0^{1/\theta} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \frac{\text{Sp } \{e^{-\mathcal{H}'_0/\theta} \mathcal{H}'_1(t_1) \dots \mathcal{H}'_1(t_n)\}}{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}'_0/\theta}},$$

где

$$\mathcal{H}'_1(t) = e^{\mathcal{H}'_0 t} \mathcal{H}'_1 e^{-\mathcal{H}'_0 t} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_{\mathbf{p}}^+(t) \Lambda_{\mathbf{p}'}(t),$$

и учтем, что при данной операторной конструкции гамильтониана \mathcal{H}'_0 при расчете средних значений мы можем воспользоваться теоремой о спариваниях (см. гл. 1, § 3, п. н)), то легко заметить, что ненулевые вклады, образованные системой спариваний в каждом из $\mathcal{H}'_1(t)$, будут давать только диагональные по операторам a и b части операторов Λ , а каждое ненулевое спаривание этих операторов из недиагональных частей операторов $\Lambda(t)$ с подобными же операторами из $\Lambda(t')$ понижает статистический вес всего вклада данного порядка по объему системы V (или по числу частиц $N = V/v$) на единицу, и этот вклад вследствие проведения предельной статистической процедуры выпадает из рассмотрения. Таким образом, в операторах $\Lambda_{\mathbf{p}}$ достаточно удержать лишь диагональные по операторам a и b конструкции, в связи с чем оператор \mathcal{H}'_1 приобретает вид (уже в терминах $(\sigma-\tau)$ -символов)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_1 = & - \sum_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} C(\mathbf{p}) + \sum_{\mathbf{p}} \frac{C^2(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})} \frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2} - \\ & - \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{C(\mathbf{p})}{\varepsilon(\mathbf{p})} \frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2} \frac{C(\mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}')} \frac{\sigma_{\mathbf{p}'} + \tau_{\mathbf{p}'}}{2} + \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{p}} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}) \frac{C^2(\mathbf{p})}{\varepsilon^2(\mathbf{p})} \left(\frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2} \right)^2. \end{aligned}$$

Последнее слагаемое, которое компенсирует снятое нами условие $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$ в двойной сумме, можно сразу опустить, так как оно имеет статистический порядок $\sim V^0 = 1$, т. е. на единицу меньше статистического порядка остальных слагаемых в операторе \mathcal{H}'_1 .

Переходя к рассмотрению системы с упрощенной моделью взаимодействия пар $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = J\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}')$ (см. § 2, п. д)), когда $C(\mathbf{p}) = \Delta = \text{const}$, получаем

$$\mathcal{H}' = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon(\mathbf{p}) \frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2} + \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Delta^2}{\varepsilon(\mathbf{p})} \frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2} - \frac{J}{4V} \left(\sum_{\mathbf{p}} \frac{\Delta}{\varepsilon(\mathbf{p})} \frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2} \right)^2,$$

где суммирование по \mathbf{p} определяется условием $|\varepsilon_{\mathbf{p}}| < \omega$. Статистическая сумма системы, характеризуемой таким гамильтонианом, рассчитывается в пределе $V \rightarrow \infty$, $n = N/V = \text{const}$ асимптотически точно.

Понизим появляющуюся в экспоненте $e^{-\mathcal{H}'/\theta}$ статистической суммы вторую степень оператора $(\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}})/2$ (недиагональная часть гамильтониана, пропорциональная константе взаимодействия J) с помощью очевидного соотношения

$$\exp \left\{ \frac{JV}{2\theta} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\Delta}{\varepsilon(\mathbf{p})} \frac{\sigma_{\mathbf{p}} + \tau_{\mathbf{p}}}{2} \right)^2 \right\} =$$

$$= \sqrt{\frac{JV}{2\theta}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{JV}{2\theta} \frac{x^2}{2} + \frac{JV}{2\theta} x \frac{1}{V} \sum_p \frac{\Delta}{\varepsilon(p)} \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right\} dx,$$

введем обозначение для возникшего в экспоненте коэффициента при операторе $(\sigma_p + \tau_p)/2$

$$\frac{1}{\theta} \left(\varepsilon(p) - \frac{\Delta^2}{\varepsilon(p)} + \frac{J}{2} \frac{\Delta}{\varepsilon(p)} x \right) = a(p, x)$$

и учтем, что

$$\begin{aligned} \sum_{\{\sigma_p, \tau_p\}} \exp \left\{ \sum_p a(p, x) \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right\} &= \prod_p \sum_{\sigma_p = \pm 1} e^{a(p, x) \sigma_p / 2} \sum_{\tau_p = \pm 1} e^{a(p, x) \tau_p / 2} = \\ &= \prod_p \left(2 \operatorname{ch} \frac{a(p, x)}{2} \right)^2 = \exp \left\{ 2 \sum_p \ln 2 \operatorname{ch} \frac{a(p, x)}{2} \right\}. \end{aligned}$$

Тогда для статистической суммы получаем

$$\begin{aligned} \zeta &= \operatorname{Sp} e^{-\mathcal{H}'/\theta} = \sum_{\{\sigma_p, \tau_p\}} e^{-\mathcal{H}'(\sigma_p + \tau_p)/\theta} = \\ &= \sqrt{\frac{JV}{2\theta}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_p \varepsilon_p - \frac{JV}{2\theta} \frac{x^2}{2} + V \frac{1}{V} \sum_p 2 \ln 2 \operatorname{ch} \frac{a(p, x)}{2} \right\}, \end{aligned}$$

и для получения окончательного ответа нам остается только взять интеграл по переменной x .

Так как гарантированной величиной статистической суммы ζ (или термодинамического потенциала $\Psi = -\theta \ln \zeta$) является лишь ее главная асимптотика по формально устремляемому к бесконечности аддитивному параметру, в качестве которого у нас фигурирует объем системы V (плотность числа частиц $n = N/V = \text{const}$), то это асимптотическое значение интеграла по переменной x можно определить с помощью метода перевала (см. т. 2, гл. 1, задачу 3), основную формулу которого в нашем частном случае можно представить в виде

$$I(V) \Big|_{V \rightarrow \infty} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{Vw(x)} dx \Big|_{V \rightarrow \infty} \stackrel{\text{as}}{=} e^{Vw(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{V|w''(x_0)|}} \left(1 + O\left(\frac{1}{V}\right) \right),$$

где точка перевала x_0 определяется из условия $w'(x_0) = 0$.

Записывая величину ζ в виде

$$\begin{aligned} \zeta &= \sqrt{\frac{JV}{2\theta}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_p \varepsilon_p \right\} \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left\{ V \left[\frac{1}{V} \sum_p 2 \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\varepsilon(p)}{2\theta} - \frac{\Delta^2}{2\theta\varepsilon(p)} + \frac{J\Delta}{4\theta\varepsilon(p)} x \right) - \frac{J}{2\theta} x^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

и приравнивая к нулю производную по x от выражения в квадратных скобках, получаем уравнение для точки x_0 , определяющей асимптотику исследуемого интеграла,

$$x_0 = \frac{1}{V} \sum_p \frac{\Delta}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon(p)}{2\theta} - \frac{\Delta^2}{2\theta\varepsilon(p)} + \frac{J\Delta}{4\theta\varepsilon(p)} x_0 \right).$$

Если исключить величину x_0 из экспоненты $e^{Vw(x_0)}$, положив $x_0 = 2\Delta/J$, то после сокращения на величину $\Delta \neq 0$ уравнение для x_0 примет вид

$$1 = \frac{J}{2V} \sum_p \frac{1}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta},$$

а величина статистической суммы окажется равной

$$\zeta \stackrel{\text{as}}{=} \sqrt{\frac{J}{2\theta n |w''(x_0)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\sum_p \left(\varepsilon_p - 2\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \right) + \frac{V}{J} \Delta^2 \right] \right\},$$

откуда для термодинамического потенциала Ψ получаем знакомое нам по § 2, п. д) выражение

$$\Psi = -\theta \ln \zeta \stackrel{\text{as}}{=} \sum_p \left(\varepsilon_p - 2\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right) + \frac{V}{J} \Delta^2,$$

удовлетворяющее условию минимума по Δ^2

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \frac{J}{2V} \sum_p \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right) = 0$$

не в силу вариационного принципа, а вследствие расположения точки перевала $x_0 = 2\Delta/J$, автоматически обеспечивающей минимальное значение термодинамического потенциала по отношению к величине энергетической щели Δ .

Таким образом, полученные нами результаты для системы с упрощенным взаимодействием электронных пар $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = J\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}')$ являются асимптотически точными во всей температурной области существования сверхпроводящего состояния, включая точку $\theta = \theta_0$ его исчезновения, которая оказалась точкой фазового перехода 2-го рода с конечным скачком теплоемкости, как это и имеет место в действительности для реально существующих сверхпроводников.

д) Принцип компенсации «опасных диаграмм»

Рассмотрим вкратце идею альтернативного, не вариационного подхода к решению проблемы сверхпроводимости, предложенного Н. Н. Боголюбовым в 1957 г. Ограничимся случаем $\theta = 0$ и рассмотрим систему, характеризуемую уже как бы «повернутым» с помощью $(u-v)$ -преобразования гамильтонианом \mathcal{H}' (см. обозначения и обсуждение в § 2, п. б))

$$\mathcal{H}' = U + \sum_p \left\{ A(p) (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + B(p) (\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p) \right\} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'}.$$

Если использовать его диагональную часть

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{p}} A(\mathbf{p})(\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}) = \sum_{\mathbf{p}} [\varepsilon_{\mathbf{p}}(u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2) + 2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}}C(\mathbf{p})] (\alpha_{\mathbf{p}}^+ \alpha_{\mathbf{p}} + \beta_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}})$$

в качестве нулевого приближения стационарной теории возмущений (см. гл. 4, § 2, п. а)), то уже во втором порядке от учета членов, содержащих операторы $(\alpha_{\mathbf{p}}^+ \beta_{\mathbf{p}}^+ + \beta_{\mathbf{p}} \alpha_{\mathbf{p}})$ возникнут «опасные» энергетические знаменатели

$$\left\langle H_1 \frac{1}{E_0 - \tilde{\mathcal{H}}_0} H_1 \right\rangle \sim \frac{1}{2[\varepsilon_{\mathbf{p}}(u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2) + 2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}}C(\mathbf{p})]},$$

которые в случае $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = 0$, т. е. в случае

$$C(\mathbf{p}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') u_{\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'} = 0,$$

приводят к расходящимся при $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}_F$ неинтегрируемым подынтегральным выражениям. Ситуация в определенном смысле аналогична той, с которой мы встретились при анализе неидеальной бозе-системы в гл. 4, § 2.

Чтобы подобных «опасных» знаменателей не возникало, положим коэффициент

$$B(\mathbf{p}) = \varepsilon_{\mathbf{p}} 2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}} - (u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2)C(\mathbf{p})$$

при упомянутой операторной конструкции равным нулю. Это сразу приводит к системе уравнений для коэффициентов $(u-v)$ -преобразования

$$u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2 = \frac{2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}}\varepsilon_{\mathbf{p}}}{C(\mathbf{p})}, \quad u_{\mathbf{p}}^2 + v_{\mathbf{p}}^2 = 1,$$

которую мы в терминах $(\lambda-\mu)$ уже решали (см. § 2, п. г)). Таким образом, получаем

$$2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}} = \frac{C(\mathbf{p})}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})}}, \quad u_{\mathbf{p}}^2 - v_{\mathbf{p}}^2 = 2u_{\mathbf{p}}^2 - 1 = \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})}}.$$

Подставляя полученное выражение для $2u_{\mathbf{p}}v_{\mathbf{p}}$ в формулу для $C(\mathbf{p})$, получаем сразу уравнение (*) для энергетической щели в случае $\theta = 0$

$$C(\mathbf{p}) = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}'} J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \frac{C(\mathbf{p}')}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}'}^2 + C^2(\mathbf{p}')}}.$$

Располагая решением для коэффициентов $u_{\mathbf{p}}$ и $v_{\mathbf{p}}$, получаем уже знакомые нам выражения для энергии основного состояния

$$E_0 = \langle 0 | \mathcal{H}' | 0 \rangle = U = \sum_{\mathbf{p}} \left(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{C^2(\mathbf{p})}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})}}$$

и для энергии квазичастичных возбуждений с характерной для сверхпроводящего состояния энергетической щелью

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \langle 0 | \alpha_{\mathbf{p}} \mathcal{H}' \alpha_{\mathbf{p}}^+ | 0 \rangle - \langle 0 | \mathcal{H}' | 0 \rangle = A(\mathbf{p}) = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{p}}^2 + C^2(\mathbf{p})}.$$

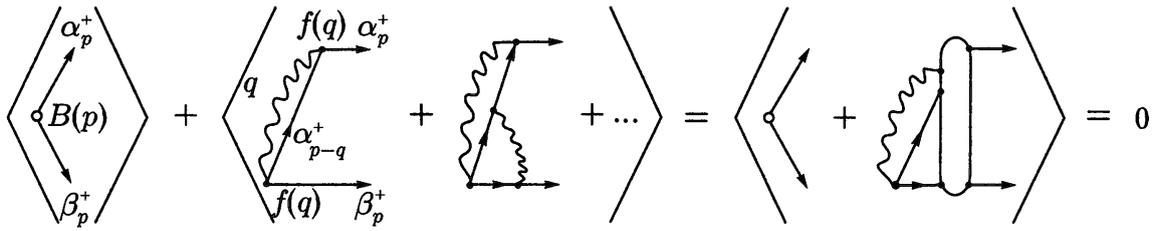


Рис. 55. Схематическое изображение компенсационной процедуры в системе с электрон-фононным взаимодействием (подробно размечена диаграмма, компенсирующая $B(p)$ во втором порядке по $f(q)$)

Аналогичной компенсационной процедурой можно воспользоваться и при анализе системы с электрон-фононным взаимодействием (то есть до перехода к эффективному четверному гамильтониану) уже во втором порядке теории возмущений, основанной на использовании в качестве нулевого гамильтониана \tilde{H}_0 диагональной по отношению к слегка «повернутым» с помощью $(u-v)$ -преобразования операторам α_p и β_p и фоновым операторам b_q формы. Характерно, что компенсируя возникающие от части гамильтониана $B(p)(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p)$ опасные знаменатели вкладом от второго порядка по константе электрон-фононного взаимодействия, мы внесем в рассмотрение именно тот знаменатель $(E_{p+q} - E_p + \omega(q))^{-1}$, который появился у нас в § 2, п. а) в процессе исключения электрон-фононного взаимодействия и введения эффективного четверного взаимодействия $\nu(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q})$.

Несмотря на то что компенсационная процедура выглядит проще использованной нами в § 2 и как бы быстрее приводит к тем же результатам для щели $C(p)$, энергий основного и возбужденных состояний системы, необходимо отметить, что она, во-первых, безтемпературная, так как целиком основывается на квантово-механической теории возмущений, и, во-вторых, компенсация в существующем варианте ее осуществления проведена только в низшем ее порядке, хотя совершенно ясно, что компенсация «вредного» действия оператора $B(p)(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p)$ должна включать и более высокие порядки по электрон-фононному взаимодействию (см. рис. 55).

Мы не будем здесь приводить всю эту в целом понятную, но технически громоздкую процедуру, ограничиваясь сделанными выше замечаниями и памятуя, что в конечном счете при доведении расчетов до конца нам по необходимости все равно придется использовать модельные представления о характере процессов взаимодействия в рассматриваемой системе.

е) Общая структура возбужденных состояний сверхпроводящего и нормального электронного газа в металлах

В заключение этого параграфа обсудим в общих чертах вопрос о зависимости энергий возбужденных состояний электронного газа в металлах от переносимых ими импульсов. Чтобы не загромождать наше рассмотрение математическими подробностями, используем полученные выше результаты для системы с модельным взаимодействием пар частиц $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = J\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}')$ и будем полагать температуру равной нулю.

Зависимость энергетической щели в этой модели весьма грубо аппроксимируется ступенчатой функцией

$$C(p) = \Delta\theta(p) = \begin{cases} \Delta & \text{в случае } |\epsilon_p| = \left| p_F \frac{p - p_F}{m} \right| < \omega \text{ или } |p - p_F| < \frac{\Delta p}{2}, \\ 0 & \text{в случае } |\epsilon_p| > \omega \text{ или } |p - p_F| > \frac{\Delta p}{2}, \end{cases}$$

где, как мы указали ранее, $\Delta p/p_F = \omega/(2\varepsilon_F) \sim 10^{-4}$. В связи с этой оценкой заметим кстати, что так как $2\varepsilon_F \sim 10^5 - 10^6$ К, то предельная величина $\omega \sim 10^{-4} 2\varepsilon_F \sim 10 - 10^2$ К, что составляет только длинноволновую часть фононного спектра (дебаевская частота $\omega_D \sim 10^2 - 10^3$ К) и оправдывает тем самым фрелиховскую модель электрон-фононного взаимодействия (см. гл. 1, § 3, п. о)). Отдавая себе отчет в том, что подобного ступенчатого поведения динамических величин в физическом мире не бывает и на самом деле величина щели $C(p)$ должна достаточно плавно сходиться на нет при $p \rightarrow \Delta p/2$, мы будем использовать эту модель, памятуя, что именно она помогла нам преодолеть все трудности по решению уравнения (*) и расчету характеристик сверхпроводящей системы.

Спектр индивидуальных возбуждений для нормальной ферми-системы вблизи границы Ферми определяется выражением

$$\varepsilon_q = \frac{(p_F + q)^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m} \cong \frac{p_F q}{m}$$

в случае $q > \Delta p/2$ (или $|\varepsilon_q| > \omega$), а в сверхпроводящем состоянии — использованной нами в § 2, п. д) параболической аппроксимацией

$$\varepsilon(q) = \sqrt{\varepsilon_q^2 + \Delta^2} \cong \Delta + \frac{q^2}{2M} = \Delta + \frac{p_F}{2m\Delta p} q^2$$

в случае $q < \Delta p/2$. Нестыковка этих формул (см. рис. 51) в точке $q = \Delta p/2$ обязана грубой ступенчатой аппроксимации величины $C(p) = \Delta\theta(p)$, о которой мы говорили выше.

Помимо индивидуальных в рассматриваемой системе существуют коллективные возбуждения, из которых мы остановимся только на продольных колебаниях плотности. Для нормального состояния электронного газа, когда возбуждения вырожденной системы имеют частично-дырочный характер, особенность фурье-образа кулоновского взаимодействия составляющих его частиц $\nu(q) = 4\pi e^2 \hbar^2 / q^2$ «поднимает» энергию возбужденных колебаний плотности с нуля при $q = 0$ до уровня ленгмюровской частоты (см. гл. 3, § 6, п. а))

$$\omega_0 = \hbar\omega_L = \hbar \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m}} \sim 10 \text{ эВ.}$$

Величина этой энергии в масштабе $\Delta \sim 10 \text{ К} \sim 10^{-3} \text{ эВ}$ оказывается весьма значительной, так как $\Delta/\omega_0 \sim 10^{-4}$.

В диапазоне $q < \Delta p/2$ кулоновское взаимодействие, как мы показали в § 3, п. в), подавлено, и плазменные колебания возникнуть уже не могут. Вместо них колебания плотности сверхпроводящего электронного газа приобретают характер акустических, энергетический спектр возбуждений которых $\tilde{\omega}(q) = \tilde{c}q$ может реализоваться, не затухая, только вне области непрерывного спектра щелевых возбуждений индивидуального типа, т. е. в области, лежащей ниже энергетической щели $\tilde{\omega}(q) < \Delta$.

Чтобы убедиться в этом, оставаясь в рамках модельных представлений о структуре функции $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$, воспользуемся приемом, с помощью которого мы проиллюстрировали в гл. 4, § 6, п. г) физический смысл низлежащей области боголюбовского спектра возбужденных состояний неидеальной вырожденной бозе-системы.

Итак, будем исходить из полученного нами в § 2, п. д) (или § 3, п. г)) выражения для свободной энергии Ψ электронного сверхпроводящего газа в случае $\theta = 0$,

$$\Psi = \frac{\rho V}{J} \cdot 2 \int_0^{\omega} (\xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}) d\xi + \frac{V}{J} \Delta^2,$$

и рассчитаем первую и вторую производные этой величины по объему V . Имеем

$$\frac{\partial \Psi}{\partial V} = \frac{\rho}{J} \cdot 2 \int_0^{\omega} (\xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}) d\xi + \frac{\Delta^2}{J} + \frac{V}{J} \left(1 - \rho \int_0^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) \frac{\partial \Delta^2}{\partial V},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} &= \frac{1}{J} \left(1 - \rho \int_0^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) \frac{\partial \Delta^2}{\partial V} + \frac{1}{J} \left(1 - \rho \int_0^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) \times \\ &\times \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} + V \frac{\partial^2 \Delta^2}{\partial V^2} \right) + \frac{V}{J} \rho \frac{1}{2} \int_0^{\omega} \left(\frac{1}{\xi^2 + \Delta^2} \right)^{3/2} d\xi \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right)^2. \end{aligned}$$

В силу условия минимума потенциала Ψ по отношению к величине Δ^2 (уравнение (*) в случае $\theta = 0$),

$$\frac{\partial \Psi(\Delta^2)}{\partial \Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \rho \int_0^{\omega} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) = 0,$$

в выражении для $\partial^2 \Psi / \partial V^2$ остается только последнее слагаемое. Стоящий в нем интеграл легко рассчитывается,

$$\frac{1}{\Delta^2} \int_0^{\omega/\Delta} \left(\frac{1}{x^2 + 1} \right)^{3/2} dx = \frac{1}{\Delta^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{\omega^2}}} \cong \frac{1}{\Delta^2} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\omega^2} \right) \cong \frac{1}{\Delta^2}$$

(мы учли здесь, что $\Delta/\omega \sim 10^{-4}$), и мы получаем

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} = \frac{V}{J} \frac{\rho}{2\Delta^2} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right)^2.$$

Выполнив этот предварительный расчет, обратимся к нашему исследованию. Имеем для квадрата скорости распространения акустических колебаний в среде

$$\tilde{c}^2 = \frac{\partial P}{\partial mn} = -\frac{V^2}{mN} \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{V^2}{mN} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} = \frac{V^2}{mN} \frac{V}{J} \frac{\rho}{2\Delta^2} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right)^2,$$

где мы учли, что давление в системе связано со свободной энергией соотношением $P = -\partial \Psi / \partial V$.

Чтобы рассчитать производную $\partial \Delta^2 / \partial V$ учтем, что согласно § 2, п. д) и зависимости параметра ω от плотности $n = N/V$

$$\Delta^2 = 4\omega^2 e^{-2/\rho}, \quad \omega \sim \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3}, \quad \frac{\partial \omega^2}{\partial V} = -\frac{2}{3} \frac{\omega^2}{V}, \quad \left| \frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right| = \frac{2}{3} \frac{\Delta^2}{V}$$

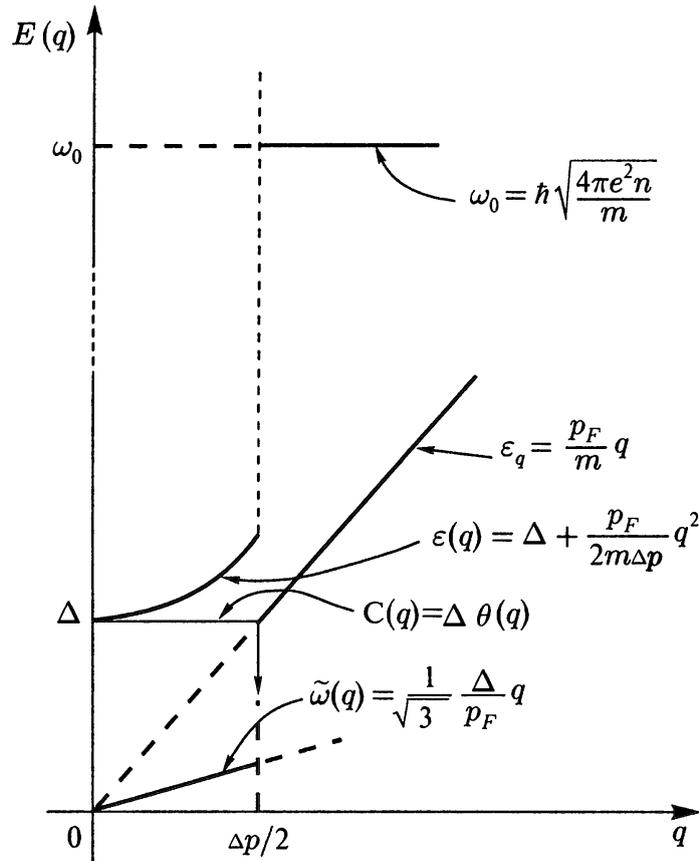


Рис. 56. Схема зависимостей от импульса $q = p - p_F$ энергий одночастичных возбуждений и коллективных продольных колебаний, характерных для электронного газа в металле в случае сверхпроводящего ($\Delta \neq 0, q < \Delta p/2$) и нормального ($\Delta = 0, q > \Delta p/2$) его состояний для упрощенной модели взаимодействия $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = J\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}')$ (ввиду того что $\omega_0/\Delta \sim 10^4$, величина плазменной частоты ω_0 помещена на схеме условно)

(мы учли, что дебаевская частота $\omega_D = (N6\pi^2 c^3 \hbar^3 / V)^{1/3}$, а величина ω составляет ее часть, $\omega < \omega_D$). Поэтому имеем

$$\tilde{c} = \sqrt{\frac{\rho}{V} \frac{1}{2\pi m} \frac{V}{\Delta} \left| \frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right|} = \sqrt{\frac{\rho}{V} \frac{1}{2\pi m} \frac{2}{3} \Delta}.$$

Вспоминая, что

$$\frac{\rho}{J} = \frac{mp_F}{2\pi^2 \hbar^3}, \quad \frac{N}{V} = n = \frac{p_F^3}{\hbar^3 3\pi^2},$$

получаем окончательно для скорости распространения продольной акустической волны

$$\tilde{c} = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta}{p_F} = \frac{1}{\sqrt{3}} v_0 \cong 0,577 v_0,$$

где v_0 — критическая скорость (см. § 1) движения электронной системы, находящейся в сверхпроводящем состоянии.

Общая схема дисперсионных зависимостей энергий возбужденных состояний упомянутых выше типов от импульса q представлена на рис. 56.

Изображенная на этом рисунке схема имеет один существенный недостаток: энергия возбужденных состояний электронного газа $\epsilon(q) = \sqrt{\epsilon_q^2 + C^2(q)}$ в точке

$q = \Delta p/2$ разрывна, что не соответствует здравому смыслу и общему виду этой зависимости, приведенному на рис. 46. Этот дефект связан не столько с принятием мультипликативной модели взаимодействия $J(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = J\theta(\mathbf{p})\theta(\mathbf{p}')$, благодаря чему стало возможным осуществить качественное исследование уравнения (*) для энергетической щели $C(p)$, сколько с предположением, что сосредоточенная в области $|q| < \Delta p/2$ вблизи границы Ферми функция $\theta(\mathbf{p})$, заранее определяющая зависимость величины $C(p)$ от импульса, имеет разрывную столообразную форму. В микроскопической теории (если она исходит из физических принципов, а не является откровенно модельной), а тем более в квантовой механике в принципе не бывает вертикальных скачков динамических величин, поэтому для сосредоточенной около $p = p_F$ функции $\theta(\mathbf{p})$ разумнее было бы предложить сглаженную конструкцию типа $\theta(q) = e^{-\frac{1}{2}q^2/(\Delta p/2)^2}$ или $\theta(q) = \cos^2(\pi q)/\Delta p$, которая обеспечивала бы непрерывную зависимость $\varepsilon(p)$ от импульса в области границы Ферми. Подобное «усовершенствование» значительно усложнило бы математическую обработку искаженного уравнения (*) и расчет Ψ , но в качественном смысле оно вряд ли изменило бы основные результаты, которые были получены с использованием простейшей модели $\theta(q)$, не говоря уже о том, что при этом сохранился бы неприятный осадок феноменологической подгонки под «реальность» зависимости величины $C(p)$ от импульса, которая на самом деле должна определяться в результате решения основного не испорченного уравнения (*) для энергетической щели.

Расцепление системы уравнений для функций Грина

§ 1. Общие положения

Разработка методов теоретического исследования неидеальных систем как в классической статистической теории, так и в квантовой представляет не только основную, но и труднейшую задачу теоретической физики. Получение точных решений оказалось возможным только для немногих модельных систем, уровень ответственности которых реальным физическим объектам, закладываемый с самого начала в микроскопическую модельную схему, довольно сложно оценить, не говоря уже об уточнении получаемых в модельной постановке результатов. Метод приближенного вторичного квантования и вариационный метод, как мы уже отмечали в гл. 4 и гл. 5, сколь бы привлекательными с интерпретационной точки зрения не являлись, регулярными аппроксимационными процедурами тоже ни в какой мере не являются.

Остается теория возмущений, которая на основе использования нулевого приближения (т. е. известных результатов для идеального газа) строит поправки к нему в виде формального ряда по целым степеням параметра g , входящего в качестве множителя, «регулирующего» величину потенциала частиц $\Phi(R)$ (или его Фурье-образа $\nu(q)$). В зависимости от целей исследования и личных пристрастий разработчиков приближенных методов существует несколько основных вариантов теории возмущений (см. например, гл. 1, § 2, п. е) и § 2, п. ж)) и целый ряд разумных ее модификаций.

В тех немногих частных случаях, когда 1-й или 2-й члены формального разложения по степеням g проясняют какое-либо теоретическое обстоятельство или оказываются достаточными для объяснения какого-либо физического эффекта, разработки специальных приемов теории возмущений, конечно, не требуется. Однако уже опыт построения теории неидеальных классических систем (см. т. 2, гл. 3, § 1) показывает, что при рассмотрении конкретных физических систем (в частности, систем низкой плотности с короткодействием или систем частиц с кулоновским взаимодействием) «поправки» к характеристикам идеального газа имеют вид не просто разложения по степеням g , а вид вириального разложения по плотности или по плазменному параметру, в частности, вириальное разложение представляет собой не разложение по «степеням» $\Phi(R)$, а по функциям Майера, включающим $e^{-\Phi(R)/\theta} - 1$, т. е. целый отсуммированный бесконечный ряд по параметру g (аналогичная ситуация имеет место и в случае плазмы).

Так как при переходе к задачам квантовой статистической физики отмеченная выше ситуация не изменяется, то становится ясным, что универсальной теории возмущений, эффективной при рассмотрении систем любого типа, построить невозможно, ее рациональная перестройка должна основываться на сочетании разложения по g с особенностями потенциала взаимодействия частиц системы и другими,

уже макроскопическими ее особенностями (температурой, плотностью, внешними полями и т. д.).

К сожалению, для многих реальных и представляющих интерес физических систем безразмерный параметр, характеризующий их «неидеальность», не оказывается малой величиной, поэтому ставшие традиционными случаи грамотного в теоретическом смысле рассмотрения систем высокой плотности, в частности систем с кулоновским взаимодействием (в качестве модели электронного газа в плазме), и систем низкой плотности (так называемого газового приближения), т. е. областей, удаленных в обе стороны от таких явлений, как фазовые переходы и т. п., оказываются изначально модельными.

Заметим, наконец, что как динамическая безтемпературная (т. е. квантово-механическая) теория возмущений (см. гл. 1, § 2, п. е)), так и безвременная термодинамическая теория возмущений (см. гл. 1, § 2, п. ж)), естественным образом в каждом порядке по g иллюстрируемые соответствующей диаграммной техникой, существенно основываются на рассмотрении средних, рассчитываемых по состояниям идеальной системы, характеризуемой гамильтонианом H_0 , на введении временного (или обратно-температурного) аргумента с помощью этого же оператора H_0 и на использовании для расчета всех многовременных (или разнотемпературных) средних от произведений операторов рождения и уничтожения с помощью теоремы о спариваниях.

В используемом нами методе двухвременных функций Грина подобная регулярная и наглядно иллюстрируемая процедура, где каждый элемент диаграммы несет совершенно определенный, равный числу линий взаимодействий в ней, порядок по g , неосуществима, так как весь метод основан на использовании цепочки уравнений для временных корреляционных средних, в которых и временной аргумент, и операция взятия среднего осуществляется с помощью полного гамильтониана системы $H = H_0 + H_1$, и теорема о спариваниях, которая в этом случае не имеет места, может использоваться лишь в качестве ориентировочных соображений.

Полученное нами основное уравнение для функций Грина

$$\mathcal{E}\langle\langle A|B\rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \langle AB - \eta BA\rangle + \langle\langle [A, H]_- | B\rangle\rangle_{\mathcal{E}},$$

представляющее собой, по существу, цепочку уравнений для функций Грина $\langle\langle A|B\rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, $\langle\langle A'|B\rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, ... со все возрастающим числом определяющих их полевых операторов, входящих в A , A' и т. д., в идейном отношении эквивалентно цепочке уравнений для зависящих от времени корреляционных функций $F_1(t, x)$, $F_2(t, x_1, x_2)$ и т. д., в которых согласно процедуре Боголюбова (см. т. 3, задания к гл. 5, § 5) целесообразно выделить «неприводимые» части, образованные корреляционными функциями более низкого ранга, именно,

$$\begin{aligned} F_2(t, x_1, x_2) &= F_1(t, x_1)F_1(t, x_2) + G_2(t, x_1, x_2), \\ F_3(t, x_1, x_2, x_3) &= F_1(t, x_1)F_1(t, x_2)F_1(t, x_3) + F_1(t, x_1)G_2(t, x_2, x_3) + \\ &+ F_1(t, x_2)G_2(t, x_3, x_1) + F_1(t, x_3)G_2(t, x_1, x_2) + G_3(t, x_1, x_2, x_3) \end{aligned}$$

и т. д., где каждая из «неприводимых» функций F_1 , G_2 и т. д. не является функцией нулевого, первого и т. д. порядка по g , а может быть при желании представлена в виде рядов формальной теории возмущений

$$F_1 = F_1^{(0)} + gF_1^{(1)} + \dots, \quad G_2 = G_2^{(0)} + gG_2^{(1)} + \dots$$

и т. д. Эта процедура выделения неприводимых корреляционных частей в функциях распределения перестраивает цепочку уравнений, которая приобретает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} F_1 = \Phi_1(F_1, G_2), \quad \frac{\partial}{\partial t} G_2 = \Phi_2(F_1, G_2, G_3)$$

и т. д., так что, к примеру, «второй» корреляционный (т. е. не по степеням g) порядок для функции F_1 определяется в результате совместного решения этих уравнений, во втором из которых функция G_3 представлена в соответствии с какими-либо соображениями в виде $G_3 = G_3(F_1, G_2)$ или вообще опущена, и т. д.

Возвращаясь к двухвременному формализму, выясним, какие функции Грина $\langle\langle A|B \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ определяют в соответствии с формулами гл. 3 интересующие нас характеристики системы с прямым центральным взаимодействием частиц, задаваемой стандартным гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + H_1 = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_{qp p'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p$$

(ради конкретности и с целью избежать учета явления конденсации будем рассматривать систему ферми-частиц, ориентируясь в основном на ее вырожденное состояние). Это — одночастичная функция Грина $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ антикоммутиационного ($\eta = -1$) типа или соответствующий ей массовый оператор, введенный нами в гл. 3, § 1, или двухчастичная функция Грина, включающая четверку входящих в H_1 полевых операторов вида $\langle\langle a_{p+q}^+ a_p | a_{p'-q}^+ a_{p'} \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ (в частности, типа плотность-плотность $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$) или $\langle\langle a_{p'} a_p | a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ (уже коммутационного типа).

Рассмотрим в качестве иллюстрации возникающей цепочки уравнений и ее дальнейшей перестройки по упомянутому нами «классическому» образцу одночастичную функцию Грина $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ (квантовый аналог классической одночастичной функции $F_1(t, x)$, записанной в E -представлении). Имеем, полагая $B = a_k^+$, $A = a_k$, $A' = a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p$ и т. д. и вычисляя коммутаторы $[A, H_1]_-$, $[A', H_1]_-$ и т. д.,

$$(\mathcal{E} - \varepsilon_k) \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = 1 - \frac{1}{V} \sum_{qp} \nu(q) \langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}},$$

$$\begin{aligned} (\mathcal{E} - \varepsilon_p - \varepsilon_{k+q} + \varepsilon_{p+q}) \langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= \Delta(p-k) \langle a_{p+q}^+ a_{p+q} \rangle - \Delta(q) \langle a_p^+ a_p \rangle + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \langle\langle a_{p+q}^+ a_{p+q'} a_{k+q-q'} | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{q'p'} \nu(q') \langle\langle (a_{p+q}^+ a_{p'-q'}^+ a_p a_{p'} a_{k+q-q'} + \\ &+ a_{p+q}^+ a_{p'-q'}^+ a_{k+q} a_{p-p'} a_{p'} + a_{p+q+q'}^+ a_{p'-q'}^+ a_{p'} a_p a_{k+q}) | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} \end{aligned}$$

и т. д. Если ограничиться этими двумя уравнениями, то становится ясным, что их достаточно только для расчета функции Грина $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ до первого порядка по ν включительно. Действительно, имеем в нулевом порядке

$$\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k}; \quad \langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} = \frac{\Delta(p-k)n_{p+q} - \Delta(q)n_p}{\mathcal{E} - \varepsilon_p - \varepsilon_{k+q} + \varepsilon_{p+q}},$$

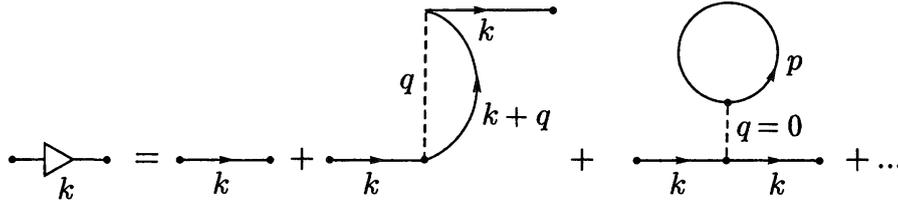


Рис. 57. Диаграммное представление одночастичной функции Грина в первом порядке по параметру взаимодействия ферми-частиц

откуда имеем, сопоставляя слагаемым правой части символические диаграммы,

$$\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} - \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \sum_q \frac{\nu(q)}{V} n_{k+q} \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} + \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \frac{\nu(0)}{V} \sum_p n_p \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} + \dots,$$

где $n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle^{(0)}$ — средние числа заполнения для идеального ферми-газа. Заметим сразу, что, представляя в этом параграфе общую теорию построения цепочки уравнений для функций Грина, мы не будем формулировать правил сопоставления аналитическим структурам (включающим элементы $\nu(q)/V$, $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, $\langle a_k^+ a_k \rangle$ и т. д., энергетические знаменатели, а также правило знаков) графических их изображений, а будем использовать возникающие в нашем изложении диаграммы в качестве иероглифов, компактно и наглядно изображающих различные, порой громоздкие конструкции отдельных членов получающихся уравнений (см. рис. 57).

Аналогичную процедуру прямого разложения по степеням ν можно представить и для массового оператора $\mathfrak{M}_k(\mathcal{E})$. Полагая

$$\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k - \mathfrak{M}_k(\mathcal{E})},$$

имеем

$$\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} + \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \mathfrak{M}_k(\mathcal{E}) \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}},$$

что можно представить в виде диаграммы, изображенной на рис. 58,

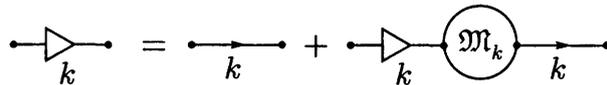


Рис. 58. Диаграммное представление полного уравнения для одночастичной функции Грина с помощью массового оператора \mathfrak{M}_k

откуда, сопоставив с уравнением для $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, получаем

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}_k(\mathcal{E}) &= \langle\langle [a_k, H_1]_- | a_k^+ \rangle\rangle (\mathcal{E} - \varepsilon_k - \mathfrak{M}_k(\mathcal{E})) = \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{qp} \nu(q) \langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} (\mathcal{E} - \varepsilon_k - \mathfrak{M}_k(\mathcal{E})) = \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{qp} \nu(q) \langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} (\mathcal{E} - \varepsilon_k - \mathfrak{M}_k^{(1)}(\mathcal{E})) - \\ &\quad - \frac{1}{V} \sum_{qp} \nu(q) \langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(1)} (\mathcal{E} - \varepsilon_k) + \dots \end{aligned}$$

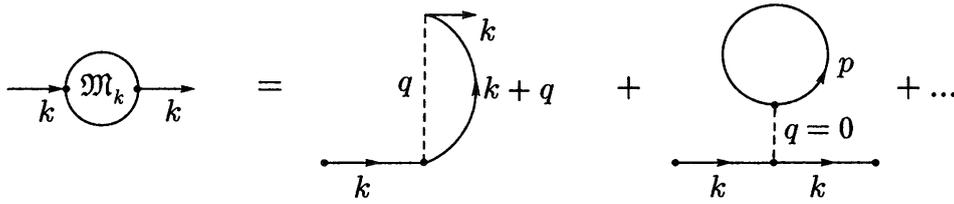


Рис. 59. Диаграммное представление массового оператора \mathfrak{M}_k в первом порядке по параметру взаимодействия ферми-частиц

Располагая нулевым приближением для двухчастичной функции Грина, получаем гарантированный первый порядок по ν для массового оператора

$$\mathfrak{M}_k(\mathcal{E}) = \mathfrak{M}_k^{(1)}(\mathcal{E}) + \dots = -\frac{1}{V} \sum_{qp} \nu(q) \frac{\Delta(p-k)n_{p+q} - \Delta(q)n_p}{\mathcal{E} - \varepsilon_p - \varepsilon_{k+q} + \varepsilon_{p+q}} (\mathcal{E} - \varepsilon_k) + \dots$$

или (см. также рис. 59)

$$\mathfrak{M}_k(\mathcal{E}) = - \sum_q \frac{\nu(q)}{V} n_{k+q} + \sum_p \frac{\nu(0)}{V} n_p + \dots$$

Следует заметить, что простота расчетов первых порядков по степеням $\nu \sim g$ для функции Грина $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ и ее массового оператора $\mathfrak{M}_p(\mathcal{E})$ обманлива: для получения следующего за первым порядком по ν результата необходимо будет не только использовать нулевые приближения для трехчастичных функций Грина и рассматривать одновременно сразу систему для функций Грина двух типов, но и переосмыслить средние значения, в частности, среднее значение $\langle a_k^+ a_k \rangle$ уже не будет иметь привычный фермиевский вид, а будет определяться с помощью функции Грина $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, взятой в соответствующем приближении

$$\begin{aligned} \langle a_k^+ a_k \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} J(a_k^+, a_k; \omega) d\omega = \\ &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} + 1} (\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} - \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega-i\varepsilon}) = \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} + 1} \text{Im} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon}. \end{aligned}$$

Все эти соображения приводят нас к необходимости рациональной перестройки цепочки уравнений для функций Грина. Конечно, использование массового оператора тоже означает перестройку системы аппроксимации: подстановка его 1-го порядка в функцию $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ определяет одночастичную функцию Грина отнюдь не только в первом порядке,

$$\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} \cong \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k - \mathfrak{M}^{(1)}(\mathcal{E})} = \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \mathfrak{M}^{(1)}(\mathcal{E}) \right]^n,$$

но это решение (оно нам необходимо в запаздывающем варианте, когда $\mathcal{E} = \omega + i\varepsilon$) помимо величины обменной энергии (первой поправки к внутренней энергии иде-

ального ферми-газа) мало что дает в теоретическом исследовании неидеальных ферми-систем, в частности, вследствие $\text{Im } \mathcal{M}^{(1)}(\omega + i\epsilon) = 0$ не определяет релаксационных процессов (см. гл. 3, § 2), характерных, к примеру, для электронного газа в металлах.

Заимствуя идею этой общей перестройки из классической теории корреляционных функций, рассмотрим среднее значение от четырех операторов рождения и уничтожения, соответствующее двухчастичной корреляционной функции F_2 (см. гл. 1, § 4 и гл. 3, § 1, п. а)) сразу в нужном для нас варианте $A = a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p$, $B = a_k^+$. Тогда, вводя новую корреляционную величину $\langle BA \rangle^{(1)}$ с помощью соотношения

$$\langle a_k^+ a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p \rangle = \langle a_k^+ a_k \rangle \langle a_{p+q}^+ a_{p+q} \rangle (\Delta(p-k) - \Delta(q)) + \langle a_k^+ a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p \rangle^{(1)},$$

где первое слагаемое, которое в случае идеальной ферми-системы, характеризуемой гамильтонианом \mathcal{H}_0 , явилось бы следствием использования теоремы о спариваниях,

$$\langle a_k^+ a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p \rangle_0 = \overbrace{a_k^+ a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p} + \overbrace{a_k^+ a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p} = n_k n_{p+q} (\Delta(p-k) - \Delta(q)),$$

представляет как бы «несвязную» (в графическом варианте) часть корреляционной функции $\langle BA \rangle = \langle BA \rangle^{(0)} + \langle BA \rangle^{(1)}$, аналогичную первому слагаемому в классическом представлении $F_2(1, 2) = F_1(1) \cdot F_1(2) + G_2(1, 2)$, обобщенному на операторную природу величин a^+ и a , а второе слагаемое $\langle BA \rangle^{(1)}$ (аналог $G_2(1, 2)$) — существенно корреляционную (или связанную) часть двухчастичного среднего $\langle BA \rangle$, не представимого в виде произведений средних низшего (в данном простом случае — только первого) ранга (все средние в этом представлении рассчитываются с помощью статистического оператора $\rho = e^{-\mathcal{H}/\theta} / \zeta$, характеризуемого полным гамильтонианом $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + H_1$).

Если теперь в соответствии с гл. 2, § 1 ввести зависимость оператора A от времени (тоже с помощью оператора \mathcal{H}), то наше представление корреляционной функции $\langle BA(t) \rangle$ приобретет вид

$$\begin{aligned} \langle a_k^+ a_{p+q}^+(t) a_{k+q}(t) a_p(t) \rangle &= \\ &= \langle a_k^+ a_k(t) \rangle \langle a_{p+q}^+ a_{p+q} \rangle (\Delta(p-k) - \Delta(q)) + \langle a_k^+ a_{p+q}^+(t) a_{k+q}(t) a_p(t) \rangle^{(1)}. \end{aligned}$$

Переходя к энергетическому представлению (см. гл. 2, § 2, п. в)), мы получим аналогичное представление для используемых в приложениях запаздывающих функций $G^{\text{ret}}(A, B; E) = \langle \langle A|B \rangle \rangle_{E+i\epsilon}$, которое мы запишем сразу по отношению к функциям $\langle \langle A|B \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$ комплексного аргумента \mathcal{E} ,

$$\langle \langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \langle \langle a_k | a_k^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} \langle a_{p+q}^+ a_{p+q} \rangle (\Delta(p-k) - \Delta(q)) + \langle \langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}^{(1)}.$$

В предлагаемом подходе аналогичное представление надо использовать и по отношению к трехчастичным функциям Грина, фигурирующим в уравнении для $\langle \langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$, которое в условной записи можно представить в виде (без Δ -функций и импульсных индексов)

$$G_3 = G_3^{(0)} + G_3^{(1)} + G_3^{(2)} = \sum (G_1(i) n_j n_k + G_1(i) \langle j, k \rangle^{(1)} + n_i G_2^{(1)}(j, k)) + G_3^{(2)}.$$

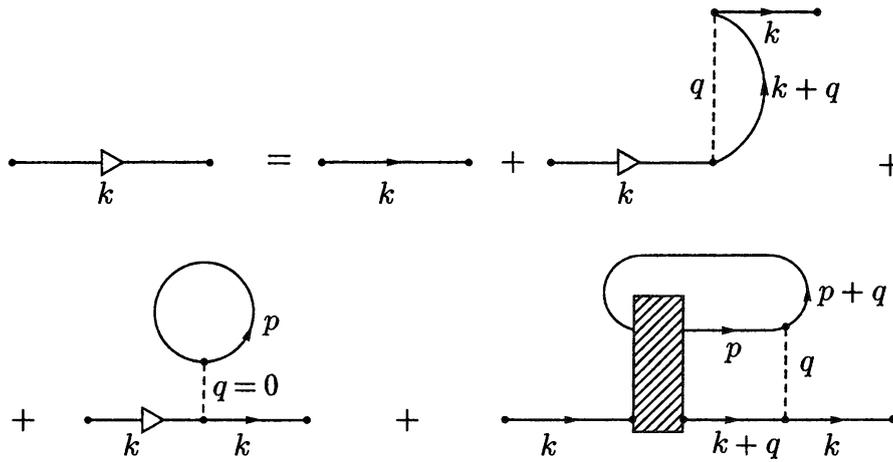


Рис. 60. Уравнение для одночастичной функции Грина $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle$ в условном диаграммном представлении

Тогда выписанное нами ранее уравнение для функции Грина $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon$ примет вид в аналитическом и диаграммном (см. рис. 60) представлениях

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon &= \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k} - \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k} \sum_q \frac{\nu(q)}{V} \langle a_{k+q}^+ a_{k+q} \rangle \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon + \\ &+ \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k} \frac{\nu(0)}{V} \sum_p \langle a_p^+ a_p \rangle \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k} \sum_{qp} \frac{\nu(q)}{V} \langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon^{(1)}. \end{aligned}$$

Уравнение для неприводимой части двухчастичной функции Грина (изображаемой заштрихованным прямоугольником с двумя входящими и двумя выходящими линиями), получаемое из уравнения для $\langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon$, намного сложнее: в правой своей части оно содержит 21 различную конструкцию, из которых мы приведем только девять (см. рис. 61), изобразив их сразу с помощью условных диаграмм (не изображенные члены правой части уравнения отличаются от приведенных различными способами включения внутренней линии взаимодействия $\nu(q)/V$).

Если исключить из рассмотрения комбинации с трехчастичными функциями Грина (из трех их вариантов мы изобразили только одну), то образуется замкнутая система уравнений для функции Грина $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon$ (большая стрелка на диаграммах) и определяемых этой функцией средних значений $\langle a_k^+ a_k \rangle$, неприводимой части двухчастичной функции $\langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon^{(1)}$ (простая штриховка) и соответствующих ей средних $\langle a_k^+ a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p \rangle^{(1)}$ (двойная штриховка).

Желая представить лишь общую структуру второго уравнения цепочки, определяющей одночастичную функцию Грина $\langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_\varepsilon$, мы намеренно не загромождали изложение аналитической формой этого уравнения и полным набором изображающих его диаграмм, так как подобные системы нелинейных интегральных уравнений без конкретизации динамических особенностей взаимодействия частиц системы и притяжения плотностных, температурных и тому подобных макроскопических параметров даже в статистической физике классических систем исследуются с большим трудом, несмотря на их значительно более простую структуру. При рассмотрении же отдельных конкретных частных случаев, соответствующих какому-либо определенному и оправданному с физической точки зрения приближению, легко усматриваются

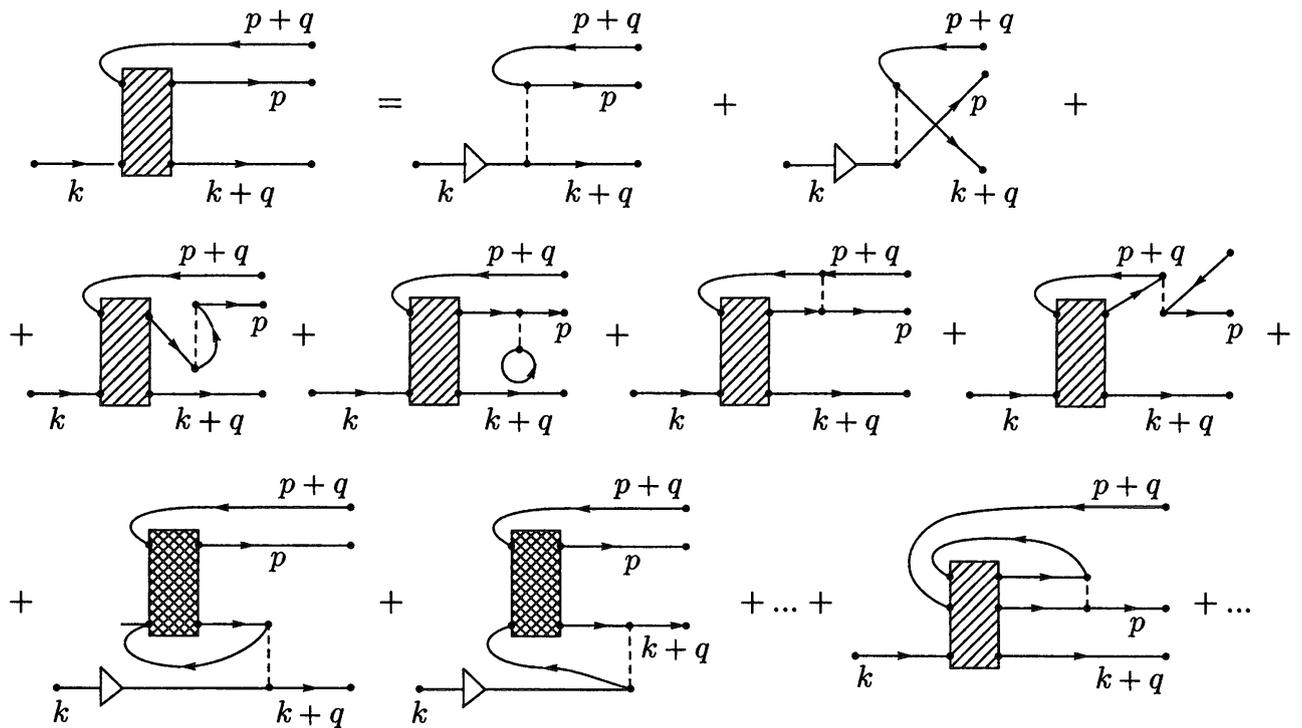


Рис. 61. Диаграммное представление уравнения для неприводимой части двухчастичной функции Грина, включающее в правой части помимо этой функции, отмеченной однократной штриховкой, одночастичные функции Грина (треугольные стрелки), неприводимые части двухчастичного среднего (двойная штриховка прямоугольников) и неприводимые части трехчастичной функции Грина

главные части этой общей системы уравнений, на основе которых (уже в значительно укороченном и обозримом виде) проводятся расчеты следующих за первым приближений для интересующей нас функции Грина.

Если с самого начала ориентироваться на определяющие многие свойства статистических систем функции Грина двухчастичного типа (см. гл. 3, §§ 1–6), в которых выбор операторов A и B непосредственно связан со структурой гамильтониана взаимодействия H_1 (в частности, $A = a_{p+q}^+ a_p$, $B = a_{k-q}^+ a_k$ или $A = a_k a_p$, $B = a_{p+q}^+ a_{k-q}^+$, см. гл. 4, § 3), то по отношению к ним можно использовать ту же процедуру выделения неприводимых частей, что и рассмотренную нами выше. Следует заметить, что в таком варианте теоретического рассмотрения неидеальной системы, когда операторы A и B состоят из произведений двух ферми-операторов, во-первых, целесообразней конструировать эти функции Грина как коммутационные, т. е. полагая $\eta = 1$, во-вторых, при выделении приводимых частей аргумент t , присутствующий в двух ферми-операторах, составляющих $A(t)$, может появиться в разных корреляционных функциях, образовав произведение, в частности, одночастичных средних $\langle a_p^+(t) a_p \rangle \langle a_k^+(t) a_k \rangle$, что сразу приводит к трудностям, связанным с использованием энергетического представления, которое нам представляется целесообразным по целому ряду формальных соображений, и в-третьих, в перестроенных уравнениях начинают играть существенную роль одночастичные корреляционные функции, т. е. исследуемая система уравнений в общем случае оказывается с самого начала незамкнутой относительно только двухчастичных функций Грина.

Несмотря на то что при рассмотрении модельных задач в главном приближении в уравнениях описываются только корреляционные функции выбранного двухчастичного типа и метод, основанный на их использовании, оказывается весьма эффективным, при расчете следующих приближений возникает необходимость

в использовании также и соответственно уточненных одночастичных корреляционных средних. Поэтому описанная нами выше методика, исходящая из уравнения для одночастичной функции Грина (или соответствующего ей массового оператора), в которой указанные трудности не возникают, оказывается в идейном отношении более замкнутой и перспективной.

§ 2. Электронный газ в компенсирующем поле кристаллической решетки

а) Динамические особенности системы

Рассмотрим неидеальную ферми-систему, определяемую гамильтонианом

$$\begin{aligned} H &= \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p = \\ &= \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{1}{2V} \sum_{q \neq 0} \nu(q) \rho_q^+ \rho_q - \frac{N}{2V} \sum_{q \neq 0} \nu(q), \end{aligned}$$

где

$$E_p = \frac{p^2}{2m}, \quad p = (\mathbf{p}, \sigma), \quad q = (\mathbf{q}), \quad \nu(q) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2}.$$

Эта система традиционно рассматривается в квантовой статистике в качестве модели электронного газа в компенсирующем поле ионной решетки металла (см. гл. 1, § 3, п. и) и § 3, п. п)), она исследовалась многими авторами, и ее свойства достаточно хорошо изучены. Мы тоже неоднократно обращались к этой модели: с целью иллюстрации общей формулы для динамической диэлектрической проницаемости (гл. 3, § 6, п. а)), для установления связи метода двухвременных функций Грина с идеями приближения самосогласованного поля (гл. 3, § 3, п. в)) и при демонстрации возможностей метода приближенного вторичного квантования (гл. 4, § 3).

Своеобразие системы, отмечаемое нами в указанных выше параграфах, состоит в возникновении существенных трудностей формальной теории возмущений, связанных с учетом дальнедействующего характера кулоновского взаимодействия частиц друг с другом. Действительно, уже во втором порядке динамической теории возмущений в разложении для энергии основного состояния по степеням $g = e^2$ вследствие зависимости $\nu(q) \sim 1/q^2$ возникает расходимость на нижнем пределе интегрирования по модулю q в члене, содержащем $\nu^2(q)$,

$$\sum_q \nu^2(q) \dots \sim \int_0 \frac{4\pi q^2 dq}{q^4} \dots \sim \int_0 \frac{dq}{q^2} \dots = \infty,$$

в третьем порядке появляются еще более сильные расходимости от членов, содержащих $\nu^3(q)$, помимо расходимостей предыдущего уровня от членов, содержащих $\nu^2(q)\nu(q')$, и т. д.

Отмеченная особенность ряда формальной теории возмущений не означает краха теории, она свидетельствует о том, что зависимость энергии основного состояния рассматриваемой модели электронного газа не представима в виде ряда «поправок» к энергии идеальной системы по целым степеням g (т. е. не является

аналитической), и за первым членом разложения по g (так называемой обменной энергией) следует не вклад, пропорциональный g^2 , а поправка с более сильной зависимостью от g (в классической теории плазмы, как мы выяснили в т. 2, гл. 3, п. д), это был вклад, пропорциональный $e^2 \sim g^{3/2}$, расчет которой и составляет главный интерес нашего исследования системы с кулоновским дальнодействием. Так как указанная «трудность» имеет исключительно динамическую природу, то она сохраняется и в температурной теории, когда усреднение осуществляется с помощью распределения Гиббса (т. е. по смешанным состояниям равновесной системы).

Построение приближений, основанных на использовании отмеченной выше динамической ситуации, характерной для систем с дальнодействием, можно представить и не прибегая непосредственно к формализму квантово-механической или температурной теории возмущений.

Пусть $\Omega(x|\nu(q))$ — в принципе существующее точное выражение для термодинамического потенциала рассматриваемой системы, функционально зависящее от Фурье-образа потенциала взаимодействия частиц $\nu(q)$. Эту зависимость можно представить в виде функционального разложения в бесконечный ряд

$$\Omega(x|\nu(q)) = \sum_{n_1, n_2, \dots} \frac{1}{n_1! n_2! \dots} \sum_{q_1, q_2, \dots} \frac{\delta^{n_1+n_2+\dots} \Omega(x|\nu(q))}{(\delta\nu(q_1))^{n_1} (\delta\nu(q_2))^{n_2} \dots} \Big|_{g=e^2=0} \nu^{n_1}(q_1) \nu^{n_2}(q_2) \dots$$

Главным приближением назовем ту часть этого бесконечного ряда, в которой каждый ее член, начиная со второго, представляет наиболее расходящуюся при $q \rightarrow 0$ величину в каждом из порядков $n = n_1 + n_2 + \dots$. Эта главная часть ряда, каждый член которого при $q \rightarrow 0$ имеет, начиная с $n = 2$, максимально возможную в своем порядке расходимость

$$\int_0^q \frac{dq}{q^{2n-2}} \sim \frac{1}{q^{2n-3}} \Big|_{q \rightarrow 0},$$

имеет вид

$$\Omega_{\text{гл}} = \sum_n \frac{1}{n!} \sum_q \frac{\delta^n \Omega}{(\delta\nu(q))^n} \Big|_{e^2=0} \nu^n(q).$$

Естественно, возникает своеобразная терминология: главное приближение — приближение «одного q » (как мы увидим, оно содержит все наиболее характерные особенности рассматриваемой системы). Поправки к нему — приближение «двух q », которое собирает расходящиеся члены, начиная с 3-го порядка и имеющие более слабую расходимость типа $1/q^{2n-5} \Big|_{q \rightarrow 0}$. Расчет этой части термодинамического потенциала оказался значительно более сложным даже для случая $\theta = 0$. Далее могли бы следовать приближения «трех q » и т. д., так что с этой точки зрения приближение низкой плотности, противоположное высокоплотностному (см. гл. 4, § 3, п. б)), должно выглядеть в каждом порядке как приближение всех разных q_1, q_2, \dots, q_n .

Осуществление изложенной выше « q -программы» внешне выглядит как процедура отбора главных членов в уравнениях для интересующих нас функций Грина, в частности, типа $\langle\langle A_q | B_q \rangle\rangle_\varepsilon$, однако эта процедура не означает расщепления этой цепочки и ее замыкания относительно этих функций. Для этого нам окажется необходимым пренебречь по сравнению с рассматриваемыми величинами $\langle\langle A_q | B_q \rangle\rangle_\varepsilon$, взятыми в приближении «одного q », корреляционными средними типа

$$\langle\langle (a_k^+ a_k - n_k) A_q | B_q \rangle\rangle_\varepsilon,$$

где $n_k = \langle a_k^+ a_k \rangle$. Прямая оценка этой аппроксимации сложна и может быть проведена лишь в частных случаях. В то же время представляется достаточно очевидным, что при рассмотрении главного приближения учет пренебрегаемых величин должен быть осуществлен в рамках более высокого приближения для функций Грина. Это вызвало бы необходимость общего повышения уровня точности всего рассмотрения и сохранения в исходных уравнениях цепочки для функций Грина членов, соответствующих следующим приближениям в терминах q -программы, в частности, необходимо было бы рассчитать функцию Грина «двух q » — $\langle \langle a_k^+ a_k A_q | B_q \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$ и функцию $\langle \langle A_q | B_q \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$, но обязательно в приближении «двух q » тоже.

б) Функция Грина типа плотность-плотность в главном приближении

Учитывая отмеченную ранее (см. гл. 4, § 3, п. б)) важную роль комплекса операторов $a_{p+q}^+ a_p$, сохраняющего при условии его «нерасторжимости» переносимое им постоянное значение величины q , а также многочисленные связи функции Грина $\langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$ с физическими характеристиками системы (см. гл. 3), сделаем рациональный выбор исходных операторов

$$A_q = \rho_q, \quad B_q = \rho_q^+ = \rho_{-q}, \quad \rho_q = \sum_p a_{p+q}^+ a_p,$$

заранее предугадывая, что этот выбор при проведении формальных выкладок не будет связан с какими-либо громоздкими построениями.

Ввиду того что $[\rho_q, \rho_{q'}]_- = 0$, целесообразно положить $\eta = 1$ и рассматривать функции Грина коммутационного типа. Учитывая, что $[\rho_q, H_1]_- = 0$, получаем

$$[\rho_q, \mathcal{H}]_- = [\rho_q, \mathcal{H}_0]_- = \sum_p \varepsilon_p [\rho_q, a_p^+ a_p]_- = \sum_p (\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}) a_{p+q}^+ a_p,$$

и первое уравнение цепочки уравнений принимает вид

$$\mathcal{E} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \sum_p (\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}) \langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}.$$

Заметим сразу, что ввиду коммутативности оператора ρ_q с гамильтонианом взаимодействия частиц H_1 это уравнение не содержит конкретной информации о рассматриваемой системе, а определяет кинематическую связь функций Грина $\langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$ и $\langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$ так же, как и очевидное соотношение

$$\langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \sum_p \langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}.$$

Чтобы составить следующее уравнение цепочки (уже для функции $\langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$), нам придется воспользоваться коммутаторами

$$[a_{p+q}^+ a_p, \mathcal{H}_0]_- = (\varepsilon_p - \varepsilon_{p+q}) a_{p+q}^+ a_p, \quad [a_{p+q}^+ a_p, \rho_{q'}]_- = a_{p+q}^+ a_{p-q'} - a_{p+q+q'}^+ a_p.$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} [a_{p+q}^+ a_p, H_1]_- &= \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{q'} \nu(q') \{ a_{p+q}^+ a_{p-q'} \rho_{-q'} - a_{p+q+q'}^+ a_p \rho_{-q'} + \rho_{q'} a_{p+q}^+ a_{p+q'} - \rho_{q'} a_{p+q-q'}^+ a_p \}. \end{aligned}$$

Если воспользоваться дополнительными коммутационными соотношениями

$$\begin{aligned} [\rho_{q'}, a_{p+q}^+ a_{p+q'}]_- &= a_{p+q+q'}^+ a_{p+q'} - a_{p+q}^+ a_p, \\ [\rho_{q'}, a_{p+q-q'}^+ a_p]_- &= a_{p+q}^+ a_p - a_{p+q-q'}^+ a_{p-q'} \end{aligned}$$

и в первых двух слагаемых сделать замену $q' \rightarrow -q'$, то второе уравнение цепочки можно представить в достаточно собранном окончательном виде

$$\begin{aligned} (\mathcal{E} + \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p) \langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} &= \langle a_{p+q}^+ a_{p+q} - a_p^+ a_p \rangle + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{q'} \nu(q') \langle \langle a_{p+q}^+ a_{p+q'} \rho_{q'} - \rho_{q'} a_{p+q-q'}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}. \end{aligned}$$

Это уравнение точно в такой же записи возникло у нас при анализе связи линеаризованных кинетических уравнений для одночастичных функций распределения с уравнениями для функций Грина (см. гл. 3, § 3, п. б)), и мы, используя физическую концепцию самосогласованного поля, решали его, превратив в замкнутое уравнение на основе «власовского» приближения для зависящей от времени парной корреляционной функции (см. гл. 3, § 3, п. в)). Теперь же, используя динамический принцип, осуществим анонсированную выше процедуру выделения главного приближения — приближения «одного q », сопровождаемого согласованным с ним пренебрежением корреляционными средними типа $\langle \langle (a_p^+ a_p - n_p) A_q | B_q \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$. Тогда, положив $q' = q$ и разделив обе части уравнения на $(\mathcal{E} + \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p)$, сразу получим

$$\langle \langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \frac{n_{p+q} - n_p}{\mathcal{E} + \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p} \left(1 + \frac{\nu(q)}{V} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} \right),$$

или, введя так называемый «поляризационный» оператор (см. гл. 4, § 3, п. б))

$$\Pi(q, \mathcal{E}) = \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{\mathcal{E} + \varepsilon_{p+q} - \varepsilon_p}$$

и просуммировав обе части полученного соотношения по p с учетом $\sum a_{p+q}^+ a_p = \rho_q$, приходим к окончательному виду решения для функции Грина типа плотность-плотность

$$\frac{\nu(q)}{V} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} = \frac{\Pi(q, \mathcal{E})}{1 - \Pi(q, \mathcal{E})},$$

которое полностью совпадает с результатом, полученным в приближении самосогласованного поля в гл. 3.

Прежде чем перейти к дальнейшим исследованиям, сделаем несколько общих замечаний, касающихся приближений, в которых мы будем, используя полученный результат для $\langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}}$, рассчитывать физические характеристики системы. Определим безразмерный параметр α , характеризующий интенсивность взаимодействия частиц друг с другом и пропорциональный первой степени величины $g = e^2$, в виде

$$\alpha = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{4p_F^2} = \frac{e^2}{(V/N)^{1/3} \tilde{\varepsilon}} \cdot \frac{1}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \cong 0,493 \frac{e^2}{a \tilde{\varepsilon}},$$

где $p_F = \hbar(3\pi^2 N/V)^{1/3}$ — граничный импульс Ферми, $a = \sqrt[3]{V/N}$ — среднее расстояние между электронами, энергия $\tilde{\varepsilon}$ и квадрат обратного радиуса экранировки κ^2

(см. гл. 3, § 6, п. а)) определяются выражениями

$$\tilde{\varepsilon} \cong \begin{cases} \varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} & \text{в случае } \theta \ll \varepsilon_F, \\ \frac{3}{2}\theta = \frac{p^2}{2m} & \text{в случае } \theta \gg \varepsilon_F; \end{cases}$$

$$\kappa^2 = \frac{6\pi e^2 N}{\tilde{\varepsilon} V} \cong \begin{cases} \kappa_F^2 & \text{в случае } \theta \ll \varepsilon_F, \\ \kappa_D^2 & \text{в случае } \theta \gg \varepsilon_F. \end{cases}$$

С физической точки зрения параметр α характеризует отношение средней энергии кулоновского взаимодействия частиц к средней кинетической их энергии $\frac{3}{5}\varepsilon_F$ или $\frac{3}{2}\theta$. В то же время для случая $\theta \cong 0$, когда $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_F$, он представляет параметр высокой плотности, отличающийся от традиционного вигнеровского параметра r_S (отношение среднего расстояния между электронами $a = (V/N)^{1/3}$ к борновскому радиусу $a_B = \hbar^2/(me^2)$) численным множителем

$$\alpha_F = \frac{me^2 a}{\hbar^2} \left(\frac{1}{3\pi^5} \right)^{1/3} \cong r_S \cdot 0,1.$$

Переходя в наших расчетах с использованием полученного выше результата для функции Грина $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_\varepsilon$ к оценке приближения с точки зрения α -терминологии, мы должны удерживать члены с такой асимптотикой по параметру взаимодействия α , которая гарантируется принятым нами приближением. В частности, для термодинамического потенциала и связанных с ним термодинамических характеристик — это члены до α^2 исключительно (поправка порядка α^2 — первая в приближении «двух q »).

В полученный нами результат входят средние числа заполнения в комбинации $\langle a_{p+q}^+ a_{p+q} \rangle - \langle a_p^+ a_p \rangle$, для определения которых у нас нет соответствующей спектральной плотности $J_p(\omega) = J(a_p^+, a_p; \omega)$. Несмотря на то что для расчета величины $n_{p+q} - n_p$ нет необходимости в использовании спектральной плотности J_p , так как в принятом нами приближении она выражается целиком через функцию Грина $\langle\langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_\varepsilon$,

$$n_{p+q} - n_p = \frac{(\mathcal{E} + E_{p+q} - E_p) \langle\langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_\varepsilon}{\left(1 + \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \langle\langle a_{p+q}^+ a_p | \rho_q^+ \rangle\rangle_\varepsilon \right)},$$

средние числа заполнения $n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle$ не только связаны с некоторыми макроскопическими характеристиками системы, но и представляют несомненный самостоятельный интерес. В нашем подходе, связанном с использованием двухчастичной функции Грина коммутационного типа $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_\varepsilon$, определение величин $\langle a_p^+ a_p \rangle$ можно осуществить на основе привлечения вариационной формулы (см. гл. 1, § 4, п. д))

$$\langle a_p^+ a_p \rangle = \frac{\delta \Omega}{\delta E_p} = \frac{\delta(\Omega_0 + \Delta \Omega)}{\delta E_p} = (n_p)_{\text{ид}} + \frac{\delta \Delta \Omega}{\delta E_p},$$

где часть термодинамического потенциала $\Delta \Omega$ непосредственно выражается по формулам гл. 3, § 1, п. в) через спектральную плотность $J_p(\omega) = J(\rho_q^+, \rho_q; \omega)$ или

$\text{Im} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon}$. Получающийся «замкнутый круг» для расчета n_p может быть использован для осуществления построения приближений для этой величины (при этом поправки к $(n_p)_{\text{ид}}$ не должны превышать точности, гарантируемой главным приближением для $\Delta\Omega$). В частности, «первый тур» этой процедуры строится на использовании для n_p выражений для средних чисел заполнения идеального ферми-газа, $n_p \rightarrow (n_p)_{\text{ид}}$. При этом, естественно, возникают потери, но они касаются, главным образом, характеристик квазичастичных возбуждений, сохраняющих вследствие сделанной аппроксимации характер возбуждений идеальной ферми-системы. Мы отложим эти вопросы до общего обсуждения результатов исследования системы.

Наконец, ввиду того что теория идеального ферми-газа разработана в форме регулярных разложений в низкотемпературной $\theta/\epsilon_F \ll 1$ и высокотемпературной $\theta/\epsilon_F \gg 1$ областях (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. в)), мы вынужденно сохраняем эту манеру исследования, интересуясь лишь первыми температурными или квазиклассическими поправками к основным результатам для полностью вырожденной или изначально классической системы.

в) Формальные свойства поляризационного оператора $\Pi(q, \mathcal{E})$

Несмотря на то, что со свойствами функции $\Pi(q, E + i\epsilon)$

$$\begin{aligned} \Pi(q, E + i\epsilon) &= \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E + E_{p+q} - E_p + i\epsilon} = \\ &= \frac{\nu(q)}{V} \sum_p n_p \left(\frac{1}{E - (E_{p+q} - E_p) + i\epsilon} - \frac{1}{E + (E_{p+q} - E_p) + i\epsilon} \right) \end{aligned}$$

мы в достаточной мере ознакомились в гл. 3, § 6, п. а) в связи с исследованием динамической диэлектрической проницаемости $\epsilon(q, E)$ электронного газа, приведем несколько встречающихся в приложениях эквивалентных выражений для ее действительной и мнимой частей

$$\Pi(q, E + i\epsilon) = R(q, E) + iI(q, E).$$

Полагая, что все написанные ниже суммы берутся после перехода к интегрированию в смысле главного значения, имеем, используя простое комбинирование суммирований в сочетании с переобозначением переменных интегрирования и учитывая симметрию величин n_p и $E_p = p^2/(2m)$ относительно своих аргументов,

$$\begin{aligned} R(q, E) &= \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{n_{p+q} - n_p}{E + E_{p+q} - E_p} = \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{n_{p+q/2} - n_{p-q/2}}{E + (\mathbf{pq})/m} = \\ &= \frac{\nu(q)}{V} \sum_p n_p (1 - n_{p+q}) \left(\frac{1}{E - (E_{p+q} - E_p)} - \frac{1}{E + (E_{p+q} - E_p)} \right) = \\ &= \frac{\nu(q)}{V} \sum_p n_p (1 - n_{p+q}) \frac{2(E_{p+q} - E_p)}{E^2 - (E_{p+q} - E_p)^2} = \\ &= \frac{\nu(q)}{V} \sum_p n_p \left(\frac{1}{E - (E_{p+q} - E_p)} - \frac{1}{E + (E_{p+q} - E_p)} \right) = \frac{\nu(q)}{V} \sum_p n_p \frac{2(E_{p+q} - E_p)}{E^2 - (E_{p+q} - E_p)^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I(q, E) &= -\pi \frac{\nu(q)}{V} \sum_p (n_{p+q} - n_p) \delta(E + E_{p+q} - E_p) = \\
&= -\pi \frac{\nu(q)}{V} \sum_p n_p \left(\delta(E - (E_{p+q} - E_p)) - \delta(E + (E_{p+q} - E_p)) \right).
\end{aligned}$$

Чтобы буквально не повторять проведенное в гл. 3, § 6, п. а) исследование, рассмотрим не классический предел, а общий случай, полагая, что распределение n_p имеет по импульсу эффективную границу p_0 , которая в случае $\theta \ll \varepsilon_F$ имеет порядок $p_0 \cong p_F$, а в случае $\theta \gg \varepsilon_F$ — порядок $p_0 \cong \sqrt{3m\theta}$.

Исследуем сначала функцию $R(q, E)$ в длинноволновом пределе $q \ll p_0$ и $E \neq 0$ ($q \ll mE/p_0$). Разлагая величины $n_{p \pm q/2}$ в области малых значений q , легко получить, что

$$n_{p+q/2} - n_{p-q/2} = \frac{\partial n_p}{\partial E_p} \frac{pq}{m} + \frac{\partial^2 n_p}{\partial E_p^2} \frac{q^2}{8m} \frac{pq}{m} + \frac{\partial^3 n_p}{\partial E_p^3} \frac{(pq)^3}{24m^3} + O(q^5).$$

Представляя знаменатель выражения для $R(q, E)$ в виде аналогичного разложения

$$\frac{1}{E(1 + \frac{pq}{mE})} = \frac{1}{E} \left(1 - \frac{pq}{mE} + \left(\frac{pq}{mE} \right)^2 - \left(\frac{pq}{mE} \right)^3 + \left(\frac{pq}{mE} \right)^4 - \dots \right),$$

полагая $pq = pqx$, $-1 \leq x \leq 1$, и беря элементарные интегралы по x , получаем с точностью до членов, пропорциональных q^5 и выше

$$\begin{aligned}
R(q, E) &= -\nu(q) \frac{2 \cdot 2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty p^2 dp \left(\frac{pq}{mE} \right)^2 \times \\
&\times \left\{ \frac{\partial n_p}{\partial E_p} \cdot \frac{2}{3} + \frac{\partial n_p}{\partial E_p} \left(\frac{pq}{mE} \right)^2 \cdot \frac{2}{5} + \frac{\partial^2 n_p}{\partial E_p^2} \frac{q^2}{8\pi} \cdot \frac{2}{3} + \frac{\partial^3 n_p}{\partial E_p^3} \frac{p^2 q^2}{24m^2} \cdot \frac{2}{5} + \dots \right\}
\end{aligned}$$

иди, переходя от интегрирования по модулю импульса p к традиционному в теории ферми-систем интегрированию по величине $\varepsilon = p^2/(2m)$, $p = \sqrt{2m\varepsilon}$, получаем

$$\begin{aligned}
R(q, E) &= -\nu(q) \cdot \frac{2 \cdot 2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \cdot (2m)^{3/2} \frac{1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^{1/2} \cdot \frac{2q^2\varepsilon}{mE^2} \times \\
&\times \left\{ \frac{2}{3} \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + \frac{2}{5} \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cdot \varepsilon \frac{2q^2}{mE^2} + \frac{2}{3} \frac{q^2}{8m} \left(\frac{\partial^2 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} + \frac{2}{5} \frac{\partial^3 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^3} \cdot \varepsilon \right) + \dots \right\}.
\end{aligned}$$

Виду того что

$$\frac{1}{r} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\partial^k n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^k} \cdot \varepsilon^r = - \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\partial^{k-1} n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^{k-1}} \varepsilon^{r-1},$$

при интегрировании по ε можно максимально понизить степень производной $\partial^k n(\varepsilon)/\partial \varepsilon^k$, произведя под знаком интеграла замены

$$\frac{2}{5} \varepsilon^{5/2} \frac{\partial^3 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^3} \mapsto -\varepsilon^{3/2} \frac{\partial^2 n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2}; \quad \frac{2}{3} \varepsilon^{3/2} \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \mapsto -\varepsilon^{1/2} n(\varepsilon); \quad \frac{2}{5} \varepsilon^{5/2} \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \mapsto -\varepsilon^{3/2} n(\varepsilon).$$

Тогда получим

$$R(\mathbf{q}, E) = \nu(q) \frac{q^2}{mE^2} \cdot \frac{2 \cdot 4\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^{1/2} n(\varepsilon) \left(1 + \frac{2q^2}{mE^2} \varepsilon + \dots \right).$$

Учитывая, что

$$\frac{2 \cdot 4\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^{1/2} n(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_p n_p = \frac{N}{V} = \frac{1}{v} = n;$$

$$\frac{2 \cdot 4\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \cdot \varepsilon^{3/2} n(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_p E_p n_p = \frac{\varepsilon_{\text{ид}}}{v},$$

где $\varepsilon_{\text{ид}}$ — удельная величина внутренней энергии идеального ферми-газа,

$$\varepsilon_{\text{ид}} = \frac{\varepsilon_{\text{ид}}}{N} = \begin{cases} \frac{3}{5} \varepsilon_F \left(1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \ll \varepsilon_F, \\ \frac{3}{2} \theta \left(1 + \frac{\pi^{3/2} \hbar^2}{4v(m\theta)^{3/2}} + \dots \right) & \text{в случае } \theta \gg \varepsilon_F, \end{cases}$$

и что $\nu(q) = 4\pi e^2 \hbar^2 / q^2$ и $\omega_0^2 = 4\pi e^2 n / m$, получаем окончательно

$$R(\mathbf{q}, E) = \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{E^2} \left(1 + \frac{2q^2}{mE^2} \varepsilon_{\text{ид}} + \dots \right).$$

Полученная оценка для функции $R(\mathbf{q}, E)$ справедлива при выполнении неравенства $E \gg p_0 q / m$. Поэтому для случая $E = 0$ (или случая близких к нулю значений E) расчет этой функции необходимо осуществить заново. Полагая в использованном выше варианте записи функции $R(\mathbf{q}, E)$ энергетический аргумент $E = 0$ и интересуясь по-прежнему случаем малых значений q , имеем в первом исчезающем по q порядке

$$R(\mathbf{q}, 0) \cong \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \frac{\frac{\partial n_p}{\partial E_p} \cdot \frac{pq}{m}}{\frac{pq}{m}} = \frac{\nu(q)}{V} \sum_p \left(-\frac{\partial n_p}{\partial \mu} \right) = -\frac{\nu(q)}{V} \frac{\partial N}{\partial \mu} = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{q^2},$$

где

$$\kappa^2 = \frac{4\pi e^2}{\frac{\partial \mu}{\partial n}}.$$

Аппроксимируя химический потенциал $\mu(\theta, n)$ его значением для идеального нерелятивистского ферми-газа

$$\mu(\theta, n) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} & \text{в пределе } \theta \ll \varepsilon_F, \\ \theta \ln \left(n \frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m \theta)^{3/2}} \right) & \text{в пределе } \theta \gg \varepsilon_F, \end{cases}$$

получаем оценки (более подробно см. гл. 3, § 6, п. а)), соответствующие квадратам обратного радиуса экранирования Томаса—Ферми или Дебая,

$$\kappa^2 = \begin{cases} \frac{6\pi e^2 n}{\varepsilon_F} = \kappa_{TF}^2 & \text{в пределе } \theta \ll \varepsilon_F, \\ \frac{4\pi e^2 n}{\theta} = \kappa_D^2 & \text{в пределе } \theta \gg \varepsilon_F. \end{cases}$$

Уточнения этого результата особого труда не составляют. Например, в случае больших значений q функция $R(\mathbf{q}, 0)$ ведет себя совершенно иначе. Воспользовавшись последним вариантом записи функции $R(\mathbf{q}, E)$, имеем, полагая $E = 0$, в пределе $q \gg p_0$, когда $E_{p+q} - E_p \cong q^2/(2m)$,

$$R(\mathbf{q}, 0) \cong -\nu(q) \frac{4m}{q^2} \frac{1}{V} \sum_p n_p = -\hbar^2 \omega_0^2 \left(\frac{2m}{q^2} \right)^2.$$

В частном случае $\theta \cong 0$ согласно тому же варианту формулы для $R(\mathbf{q}, E)$ имеем для всех значений q

$$R(\mathbf{q}, 0) = -\frac{\nu(q)}{(2\pi\hbar)^3} 2 \cdot 2\pi \int_0^{p_F} p^2 dp \int_{-1}^1 dx \frac{2}{\frac{pq}{m}x + \frac{q^2}{2m}},$$

или, после интегрирования по x и по импульсу в пределах $1 \leq p \leq p_F$ (т. е. опуская температурные поправки)

$$R(\mathbf{q}, 0) = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{q^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{p_F^2 - (q/2)^2}{2p_F q} \ln \left| \frac{p_F + q/2}{p_F - q/2} \right| \right).$$

Переходя к рассмотрению мнимой части поляризационного оператора, заметим, что несмотря на то что она рассчитывается точно, основной интерес будет составлять длинноволновое поведение функции $I(\mathbf{q}, E)$, так как в силу технических причин нам удалось получить выражение для реальной его части $R(\mathbf{q}, E)$ лишь в области $q \ll p_0$. Используя второй вариант записи функции $I(\mathbf{q}, E)$, положим $\mathbf{q} = (0, 0, q)$ (тогда $\mathbf{p}\mathbf{q}/m = p_z q/m$) и выберем в пространстве вектора \mathbf{p} направление полярной оси цилиндрических координат вдоль вектора \mathbf{q} . Тогда

$$I(\mathbf{q}, E) = -\pi\nu(q) \frac{2 \cdot 2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty p dp \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z (1 + e^{(p^2 + p_z^2 - 2m\mu)/(2m\theta)})^{-1} \times \\ \times \frac{m}{q} \left\{ \delta \left(p_z - \frac{m}{q} \left(E - \frac{q^2}{2m} \right) \right) - \delta \left(p_z + \frac{m}{q} \left(E + \frac{q^2}{2m} \right) \right) \right\}.$$

Оба интеграла рассчитываются точно: по переменной p_z — с помощью δ -функций, а по переменной z — вследствие очевидного соотношения

$$\int_0^\infty \frac{dz}{1 + e^{z+a}} = \ln(1 + e^{-a}),$$

где в нашем случае

$$z = \frac{p^2}{2m\theta}, \quad p dp = m\theta dz, \quad a = \left(\frac{p_z^2}{2m\theta} - \frac{\mu}{\theta} \right) \Big|_{p_z = \pm \frac{m}{q} \left(E \mp \frac{q^2}{2m} \right)} = \frac{m}{2\theta q^2} \left(E \mp \frac{q^2}{2m} \right) - \frac{\mu}{\theta}.$$

В итоге получаем общее выражение

$$I(q, E) = -\pi\nu(q) \frac{4\pi m^2 \theta}{(2\pi\hbar)^3 q} \ln \frac{1 + \exp \left\{ -\frac{m}{2\theta q^2} \left(E - \frac{q^2}{2m} \right) + \frac{\mu}{\theta} \right\}}{1 + \exp \left\{ -\frac{m}{2\theta q^2} \left(E + \frac{q^2}{2m} \right) + \frac{\mu}{\theta} \right\}}.$$

Ввиду того что

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \theta \ln \left(1 + e^{A_{\mp}(q, E)/\theta} \right) \Big|_{\theta \rightarrow 0} = \begin{cases} 0 & \text{в случае } A_{\mp}(q, E) < 0, \\ A_{\mp}(q, E) & \text{в случае } A_{\mp}(q, E) > 0, \end{cases}$$

где

$$A_{\mp}(q, E) = -\frac{m}{2\theta q^2} \left(E \mp \frac{q^2}{2m} \right) + \frac{\mu}{\theta},$$

функция $I(q, E)$ в случае $\theta = 0$ оказывается разрывной, имеющей различные аналитические выражения в областях с разными сочетаниями знаковых индексов у величин $A_-(q, E)$ и $A_+(q, E)$. Границы этих областей на плоскости $(q-E)$ определяются соотношениями

$$\frac{m}{2q^2\mu} \left(E \mp \frac{q^2}{2m} \right)^2 - 1 = 0$$

и $E > 0$ (функция $I(q, E)$ нечетна по E). Так как согласно сказанному выше нас будет интересовать случай малых q и конечных значений E , т. е. область

$$0 \leq \frac{q^2}{2m} \leq \frac{q_0^2}{2m} = 2\mu + E - 2\mu \sqrt{1 + \frac{E}{\mu}},$$

в которой $A_+(q, E) < 0$, то, учитывая, что $\ln(1+x) \cong x$ при $x \ll 1$, получаем в случае $q < q_0$ и $\theta/\mu \ll 1$ экспоненциально малую величину (обращающуюся в ноль при $\theta = 0$) мнимой части поляризационного оператора $\Pi(q, E)$,

$$I(q, E) \cong -\pi\nu(q) \frac{4\pi m^2 \theta}{(2\pi\hbar)^3 q} \exp \left\{ -\frac{\mu}{\theta} \left(\frac{m}{2q^2\mu} \left(E - \frac{q^2}{2m} \right)^2 - 1 \right) \right\}.$$

При увеличении q до значений, близких к q_0 , оба слагаемых под знаком логарифма (экспонента и единица) становятся соизмеримыми, и величина $-I(q, E)$, как это показано на рис. 62, резко возрастает (как бы температурное размытие резкой границы, характерной для поведения функции $I(q, E)$ в случае $\theta = 0$),

$$\begin{aligned} I(q, E) &\cong -\pi\nu(q) \frac{4\pi m^2 \theta}{(2\pi\hbar)^3 q} \ln \left(1 + \exp \left\{ -\frac{\mu}{\theta} \sqrt{1 + \frac{E}{\mu}} \frac{q_0^2 - q^2}{q_0^2} \right\} \right) \cong \\ &\cong -\pi\nu(q) \frac{4\pi m^2 \theta}{(2\pi\hbar)^3 q} \left(\ln 2 + \frac{\mu}{\theta} \sqrt{1 + \frac{E}{\mu}} \frac{q - q_0}{q_0} \right), \end{aligned}$$

где $(q_0^2 - q^2)/q_0^2 \ll \theta/\mu$.

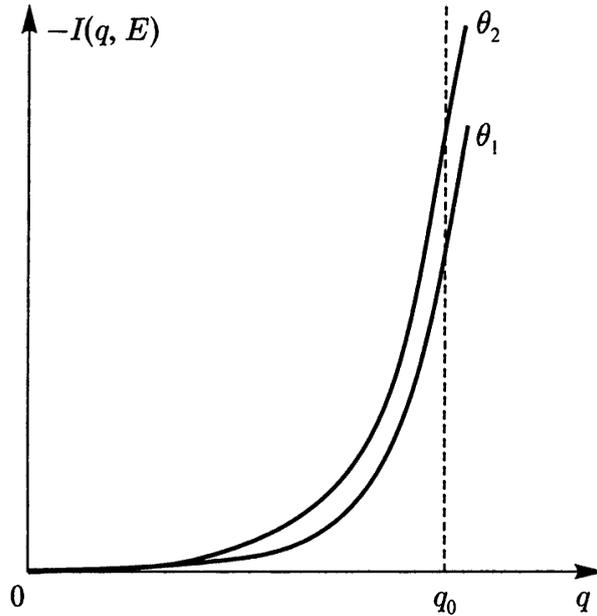


Рис. 62. Характер зависимости функции $-I(q, E) = -\text{Im } \Pi(q, E)$ от q в вырожденном случае для двух значений температуры, $\theta_2 > \theta_1$

В квазиклассическом приближении, используя малую величину $e^{\mu/\theta} \ll 1$ в качестве параметра разложения, из основной формулы для $I(q, E)$ получаем

$$I(q, E) \cong -\pi\nu(q) \frac{4\pi m\theta^2}{(2\pi\hbar)^3 q} e^{\mu/\theta} \left(\exp \left\{ -\frac{m}{2\theta q^2} \left(E^2 + \left(\frac{q^2}{2m} \right)^2 - E \frac{q^2}{m} \right) \right\} - \exp \left\{ -\frac{m}{2\theta q^2} \left(E^2 + \left(\frac{q^2}{2m} \right)^2 + E \frac{q^2}{m} \right) \right\} \right),$$

или, учитывая первую квантовую поправку к химическому потенциалу классического газа (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. б)),

$$e^{\mu/\theta} \cong e^{\mu_{\text{кл}}/\theta} \left(1 + \left(\frac{1}{2} \right)^{3/2} e^{\mu_{\text{кл}}/\theta} \right), \quad e^{\mu_{\text{кл}}/\theta} = \frac{n(2\pi\hbar)^3}{2(2\pi m\theta)^{3/2}},$$

и исключая его из выражения для $I(q, E)$, получаем в приближении $\theta \gg \epsilon_F$

$$I(q, E) \cong -\frac{\nu(q)}{q} \frac{n\sqrt{\pi m}}{\sqrt{2\theta}} 2 \text{sh} \frac{E}{2\theta} \exp \left\{ -\frac{mE^2}{2q^2\theta} - \frac{q^2}{8\theta m} \right\} \times \left(1 - \frac{n(2\pi\hbar)^3}{4(2\pi m\theta)^{3/2}} \left(\exp \left\{ -\frac{mE^2}{2q^2\theta} \right\} - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right).$$

Полагая $E = \hbar\omega$, $q = \hbar k$ и формально устремляя \hbar к нулю, получаем отсюда чисто классическую асимптотику выражения для $I(q, E)$ (см. гл. 3, § 6, п. а))

$$I(k, \omega)_{\text{кл}} = -\frac{4\pi e^2 n\omega \sqrt{\pi m}}{k^3 \theta \sqrt{2\theta}} \exp \left\{ -\frac{m\omega^2}{2k^2\theta} \right\}.$$

г) Спектральные свойства и диэлектрические характеристики системы

Если воспользоваться установленной в гл. 3, § 6, п. а) связью функции Грина $\langle\langle\rho_q|\rho_q^+\rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ с динамической диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\mathbf{q}, E)$, то в исследуемом нами главном приближении будем иметь

$$\epsilon(\mathbf{q}, E) = \left(1 + \frac{\nu(q)}{V} \langle\langle\rho_q|\rho_q^+\rangle\rangle_{E+i\epsilon}\right)^{-1} \cong \left(1 + \frac{\Pi(\mathbf{q}, E + i\epsilon)}{1 - \Pi(\mathbf{q}, E + i\epsilon)}\right)^{-1} = 1 - \Pi(\mathbf{q}, E + i\epsilon).$$

Исследование резонансных свойств системы (т. е. спектра энергий возбужденных ее состояний и их затухания), определяемых расположением полюсов функции Грина $\langle\langle\rho_q|\rho_q^+\rangle\rangle_{E+i\epsilon}$ или условием $\epsilon(\mathbf{q}, E) = 0$, проведенное в основном в гл. 3, § 6, п. а), основывается на решении относительно величины E уравнения

$$1 = \Pi(\mathbf{q}, E + i\epsilon) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{1}{V} \sum_p n_p (1 - n_{p+q}) \frac{2(E_{p+q} - E_p)}{(E + i\epsilon)^2 - (E_{p+q} - E_p)^2},$$

графическое представление левой и правой частей которого (см. гл. 3, § 6, п. а), рис. 20) обнаруживает два типа решений для зависимости $E = E(q)$. Так, если величина E находится вблизи какой-либо из асимптот $E_{p+q} - E_p$, т. е. $E \cong E_{p+q} - E_p$, то из всех слагаемых в сумме по p существенным окажется только одно,

$$y = \frac{1}{E + i\epsilon - (E_{p+q} - E_p)} \cdot \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2} \frac{4}{V} n_p (1 - n_{p+q}) \frac{E_{p+q} - E_p}{E + (E_{p+q} - E_p)} \cong \\ \cong \frac{n_p (1 - n_{p+q})}{E + i\epsilon - (E_{p+q} - E_p)} \cdot \frac{2\nu(q)}{V},$$

в связи с чем решение уравнения $y = 1$ дает

$$E = E_{p+q} - E_p + O\left(\frac{1}{V}\right).$$

Это — энергетический спектр возбуждений отдельных частиц системы, совершающих переход $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{q}$, в вырожденном случае интерпретируемый благодаря множителю $n_p(1 - n_{p+q})$ как спектр частично-дырочного ($p < p_F$, $|\mathbf{p} + \mathbf{q}| > p_F$) возбужденного состояния.

Помимо этого квазинепрерывного спектра (в пределе $V \rightarrow 0$, $N/V = \text{const}$ переходящего в непрерывный) имеется изолированный полюс функции $\langle\langle\rho_q|\rho_q^+\rangle\rangle_{E+i\epsilon}$, определяемый уравнением

$$1 - R(\mathbf{q}, E) - iI(\mathbf{q}, E) = 0.$$

Это уравнение за исключением случая $\theta = 0$, когда $I(\mathbf{q}, E) = 0$, не имеет решений на действительной оси E . Эта ситуация не является исключительной: в теории колебаний при учете диссипативных потерь энергии это как раз и определяет релаксационный характер колебательных процессов. Так как согласно требованиям, сформулированным в гл. 2, § 2, п. г), полюса запаздывающей функции Грина должны располагаться в нижней полуплоскости энергии, то, аналитически продолжая полученные нами выражения для функций $R(\mathbf{q}, E)$ и $I(\mathbf{q}, E)$ на комплексную \mathcal{E} -плоскость, будем искать решение уравнения, определяющего расположение этих полюсов, $\mathcal{E} = \Omega(q) - i\Gamma(q)$, где $\Gamma(q) > 0$, в виде

$$1 - R(\mathbf{q}, \Omega - i\Gamma) - iI(\mathbf{q}, \Omega - i\Gamma) = 0,$$

имея при этом в виду, что согласно гл. 3, § 2, п. в) о возбужденных состояниях системы или ее резонансах можно говорить лишь в случае $\Gamma(q)/\Omega(q) \ll 1$.

Подставляя в это уравнение заготовленное в предыдущем пункте в) выражение для $R(\mathbf{q}, E)$, получаем

$$1 - \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{\Omega^2 (1 - i\frac{\Gamma}{\Omega})^2} \left(1 + \frac{2q^2 \varepsilon_{\text{нд}}}{m\Omega^2 (1 - i\frac{\Gamma}{\Omega})^2} + \dots \right) - iI(q, \Omega - i\Gamma) = 0.$$

Интересуясь только главным результатом, сохраним в полученном уравнении относительно величин $\Omega(q)$ и $\Gamma(q)$ только основные вклады в действительную и мнимую его части, полагая

$$\left(1 - i\frac{\Gamma}{\Omega} \right)^2 \cong 1 + i2\frac{\Gamma}{\Omega} \quad \text{и} \quad iI(q, \Omega - i\Gamma) \cong iI(q, \Omega).$$

Тогда, приравнявая действительные части уравнения, получаем

$$\Omega^2 \cong \hbar^2 \omega_0^2 \left(1 + \frac{2q^2 \varepsilon_{\text{нд}}}{m\Omega^2} \right) \cong \hbar^2 \omega_0^2 \left(1 + \frac{2q^2 \varepsilon_{\text{нд}}}{m\hbar^2 \omega_0^2} \right),$$

или окончательно с точностью до поправки, пропорциональной q^2 ,

$$\Omega = \hbar\omega \cong \hbar\omega_0 \left(1 + \frac{q^2}{m} \frac{\varepsilon_{\text{нд}}}{\hbar^2 \omega_0^2} \right),$$

$$\varepsilon_{\text{нд}} = \begin{cases} \frac{3}{5} \varepsilon_F \left(1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right) & \text{в случае } \theta \ll \varepsilon_F, \\ \frac{3}{2} \theta \left(1 + \frac{\pi^{3/2} \hbar^3}{4v(m\theta)^{3/2}} + \dots \right) & \text{в случае } \theta \gg \varepsilon_F. \end{cases}$$

Приравнявая мнимые части уравнения, имеем в случае $\theta \ll \varepsilon_F$

$$\frac{\Gamma}{\Omega} = \frac{\gamma}{\omega} \cong -\frac{1}{2} I(q, \hbar\omega_0) \cong \frac{\pi}{8} \frac{\kappa_{TF}^2}{k_F^2} \cdot \frac{\theta}{\varepsilon_F} \cdot \frac{k_F^3}{k^3} \exp \left\{ -\frac{\varepsilon}{\theta} \left(\frac{1}{3} \frac{\kappa_F^2}{k^2} - 1 \right) \right\},$$

где $k = q/\hbar$, $k_F = p_F/\hbar$ и $\kappa_{TF}^2 = 6\pi e^2 n/\varepsilon_F$. Полагая в соответствии с рис. 21 (см. гл. 3, § 6, п. а)), что максимальный импульс плазменных колебаний определяется соотношением $k_0^2 \cong \kappa_{TF}^2/3$ (что соответствует минимальной длине их волн $\lambda_0 \cong r_{TF} = 1/\kappa_{TF}$), в области исчезновения этих колебаний, когда $k \leq k_0 = q_0/\hbar$, имеем

$$\frac{\gamma}{\omega} \cong \frac{\pi}{8} \frac{\kappa_{TF}^2}{k_F^2} \cdot \frac{\theta}{\varepsilon_F} \cdot \frac{k_F^3}{k^3} \left(\ln 2 + \frac{\varepsilon_F}{\theta} \sqrt{1 + \frac{\hbar\omega_0 k - k_0}{\varepsilon_F} \frac{k_0}{k_0}} \right).$$

В случае невырожденной системы, когда $\theta \gg \varepsilon_F$, для затухания плазменных колебаний получаем классический результат Ландау

$$\frac{\gamma}{\omega} \cong -\frac{1}{2} I(q, \hbar\omega_0) \cong \frac{\omega_0}{2} \cdot \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{\hbar^3 k^3} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{m^{3/2}}{\theta^{3/2}} \hbar\omega_0 \exp \left\{ -\frac{m\hbar^2 \omega_0^2}{2\hbar^2 k^2 \theta} \right\} = \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{\kappa_D^3}{k^3} \exp \left\{ -\frac{\kappa_D^2}{2k^2} \right\},$$

где $\kappa_D^2 = 4\pi e^2 n/\theta$ и $\omega_0^2 = 4\pi e^2 n/m$.

Рассматривая электростатический случай $E = 0$, имеем $I(q, 0) = 0$ и в соответствии с длинноволновым приближением

$$\epsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 - \Pi(\mathbf{q}, 0) = 1 - R(q, 0) \cong -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{q^2},$$

что сразу определяет в вырожденном и невырожденном случаях экранировку кулоновского потенциала взаимодействия (см. гл. 3, § 6, п. а))

$$\tilde{\nu}(\mathbf{k}) = \frac{\nu(\mathbf{k})}{\epsilon(\mathbf{k}, 0)} \cong \frac{4\pi e^2}{k^2 + \kappa^2} \mapsto \tilde{\Phi}(R) = \frac{e^2}{R} e^{-\kappa R}.$$

Формально можно без особого труда рассмотреть, конечно, и случай $q \gg p_0$, когда вне зависимости от вырожденности системы

$$R(q, 0) \cong -\hbar^2 \omega_0^2 \left(\frac{2m}{q^2} \right)^2.$$

Тогда

$$\tilde{\nu}(\mathbf{k}) \cong \frac{4\pi e^2 k^2}{k^4 + (2m\omega_0/\hbar)^2} \mapsto \tilde{\Phi}(R) = \frac{e^2}{R} e^{-\sqrt{m\omega_0/\hbar} R} \cos \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} R \right),$$

однако этот результат, исходящий из приближения $q \gg p_0$ (т. е. оправданный в области $R \ll \hbar/p_0$) имеет скорее академический интерес ввиду общего характера принятого нами приближения.

Полученные выше формулы для статической диэлектрической проницаемости $\epsilon(\mathbf{k}, 0)$ позволяют довольно просто рассмотреть явление поляризации системы, в которую внесен точечный заряд Q . Если использовать представление плотности внешнего заряда в виде, предложенном в гл. 3, § 6, п. а),

$$q(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\Omega} e \alpha_{\mathbf{k}\Omega} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{i}{\hbar} \Omega t} \cdot e^{\frac{\epsilon}{\hbar} t},$$

то случай точечного заряда, помещенного в начало координат, $q(\mathbf{r}, t) = Q\delta(\mathbf{r})$ соответствует выбору $\alpha_{\mathbf{k}\Omega} = Q/e$.

Так как согласно гл. 3, § 2, п. б) реакция системы на внешнее динамическое возмущение

$$\delta H_t = \alpha V e^{-\frac{i}{\hbar}(E-i\epsilon)t}$$

определяется соотношением

$$\langle A(t) \rangle = \langle A \rangle + \alpha e^{-\frac{i}{\hbar}(E-i\epsilon)t} \langle \langle A|B \rangle \rangle_{E+i\epsilon},$$

то ввиду того что $\langle \rho_{\mathbf{k}} \rangle = 0$, имеем

$$\langle \rho_{\mathbf{k}}(t) \rangle \Big|_{\Omega=0} = \frac{4\pi e^2}{k^2} \alpha_{\mathbf{k}0} \frac{1}{V} \langle \langle \rho_{\mathbf{k}} | \rho_{\mathbf{k}}^+ \rangle \rangle_{0+i\epsilon},$$

откуда, переходя к координатному представлению, получаем для пространственного распределения плотности поляризационного заряда

$$\rho(R) = Q \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \frac{\nu(\mathbf{k})}{V} \langle \langle \rho_{\mathbf{k}} | \rho_{\mathbf{k}}^+ \rangle \rangle_{0+i\epsilon}.$$

Если воспользоваться полученной в пункте в) этого параграфа длинноволновой аппроксимацией $\Pi(q, 0) \cong -\kappa^2/k^2$, то эта формула приводит к естественному результату

$$\rho(R) = -Q \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{\kappa^2}{k^2 + \kappa^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} = -Q \frac{\kappa^2}{4\pi R} e^{-\kappa R}, \quad \int \rho(R) d\mathbf{r} = -Q,$$

имеющему одинаковый вид как в классическом ($\kappa = \kappa_D$), так и в вырожденном ($\kappa = \kappa_{TF}$) случаях.

Если же исследовать вопрос о распределении плотности поляризационного заряда более подробно, в частности в вырожденном случае $\theta = 0$, когда мы можем использовать всеволновой результат для $R(q, 0)$, полученный в пункте в) этого параграфа,

$$\Pi(q, 0) = R(q, 0) = -\frac{\kappa_{TF}^2}{k^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} f\left(\frac{k}{2k_F}\right) \right),$$

где

$$f\left(\frac{k}{2k_F}\right) = \frac{1 - (k/(2k_F))^2}{2k/(2k_F)} \ln \left| \frac{1 + k/(2k_F)}{1 - k/(2k_F)} \right|, \quad f\left(\frac{k}{2k_F}\right) \Big|_{k=0} = 1,$$

то обнаруживается специфический квантовый эффект протяженных (не спадающих экспоненциально) осцилляций в распределении плотности индуцированного объемного заряда $\rho(R)$. Вследствие уточненного выражения для $R(q, 0)$ интегральное представление этого распределения приобретает более сложный вид

$$\begin{aligned} \rho(R) &= Q \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \frac{R(q, 0)}{1 - R(q, 0)} = \\ &= -\frac{Q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi\kappa^2}{R} \int_0^\infty \sin kR \cdot k dk \frac{\frac{1}{2}(1 + f(k/(2k_F)))}{k^2 + \kappa^2 \cdot \frac{1}{2}(1 + f(k/(2k_F)))}. \end{aligned}$$

Если вычестить из этого выражения величину $\rho_{TF}(R)$, соответствующую длинноволновому приближению $f(k/(2k_F)) = 1$ и перейти к безразмерным переменным $x = k/(2k_F)$ и $\alpha = (\kappa_{TF}/(2k_F))^2 \sim e^2$, то для «остатка» от экспоненциального томас-фермиевского распределения плотности заряда получим

$$\begin{aligned} \Delta\rho(R) &= \rho(R) - \rho_{TF}(R) = \\ &= -\frac{Q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi\kappa^2}{R} \int_0^\infty \sin(2k_F R x) \cdot x dx \left(\frac{\frac{1}{2}(1 + f(x))}{x^2 + \alpha \frac{1}{2}(1 + f(x))} - \frac{1}{x^2 + \alpha} \right). \end{aligned}$$

Взяв этот интеграл дважды по частям, удерживая при этом только главный порядок по малому параметру $\alpha \sim e^2$, можно представить его в виде

$$\Delta\rho(R) = -\frac{Q \cdot 4\pi\kappa_{TF}^2}{(2\pi)^3 R (2k_F R)^2} \cdot I(R),$$

где

$$I(R) = P \int_0^\infty \frac{x \sin(2k_F R x)}{(x^2 - 1)(x^2 + \alpha)} dx = \frac{1}{2} \operatorname{Im} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i2k_F R x} x dx}{(x+1)(x-1)(x+i\sqrt{\alpha})(x-i\sqrt{\alpha})}.$$

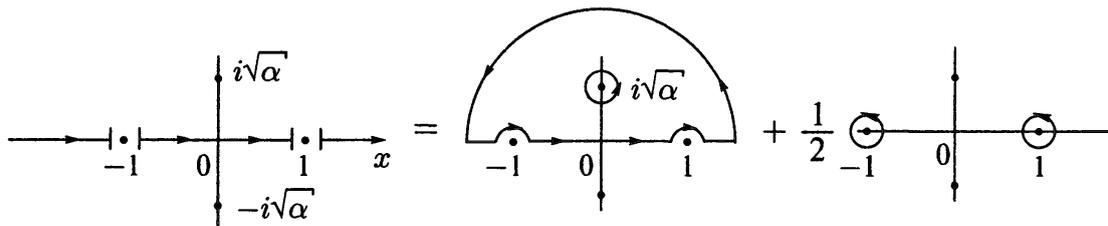


Рис. 63. Расположение особенностей подынтегрального выражения на комплексной x -плоскости величины $I(R)$, определяющей распределение плотности заряда $\Delta q(R)$, и выбор контура интегрирования, эквивалентного взятию интеграла в смысле главного значения

Этот интеграл непосредственно сводится к контурному на комплексной плоскости x с помощью схемы, приведенной на рис. 63.

Беря вычеты от подынтегрального выражения в точке $x = i\sqrt{\alpha}$ и полувычеты относительно точек $x = -1$ и $x = 1$, получаем

$$\begin{aligned} I(R) &= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left\{ 2\pi i \frac{e^{-2k_F R \sqrt{\alpha}} i \sqrt{\alpha}}{(-\alpha - 1) 2i \sqrt{\alpha}} + \pi i \frac{e^{i2k_F R} + e^{-i2k_F R}}{2(1 + \alpha)} \right\} = \\ &= \frac{\pi}{2(1 + \alpha)} \{ \cos(2k_F R) - e^{-\kappa_{TF} R} \}, \end{aligned}$$

откуда следует выражение для общего распределения плотности индуцированного заряда (в приближении $\alpha \ll 1$)

$$\rho(R) = \rho_{TF}(R) + \Delta\rho(R) \cong -\frac{Q^2 \kappa_{TF}^2}{4\pi R} \left\{ e^{-\kappa_{TF} R} + \frac{\cos(2k_F R) - e^{-\kappa_{TF} R}}{(1 + \alpha)(2k_F R)^2} \right\},$$

в котором наиболее интересен осциллирующий вклад

$$\Delta\tilde{q}(R) \cong -\frac{Q \kappa_{TF}^2}{4\pi(1 + \alpha)} \frac{\cos(2k_F R)}{R(2k_F R)^2},$$

имеющий не экспоненциальную $e^{-\kappa_{TF} R}$, а значительно медленнее спадающую на больших расстояниях асимптотику $1/R^3$ с периодом осцилляций $R = \pi/k_F$. Аналогичные осцилляции с тем же периодом мы обнаружим в дальнейшем и у парной корреляционной функции (помимо осцилляций кинематического происхождения, характерны для функции $F_2(R)$ идеального ферми-газа, см. гл. 1, § 4, п. е)).

д) Термодинамический потенциал и выражающиеся с его помощью величины

Располагая функцией Грина $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$, имеем согласно гл. 3, § 1, п. в) для той же части термодинамического потенциала Ω , которая учитывает взаимодействие частиц в системе

$$\begin{aligned} \Delta\Omega(\theta, V, \mu) &= \Omega(\theta, V, \mu) - \Omega(\theta, V, \mu)_{\text{ид}} = \int_0^1 \frac{dg}{g} \langle g H_1 \rangle^{(g)} = \\ &= \int_0^1 \frac{dg}{g} \frac{1}{2V} \sum_q g \nu(q) \langle \rho_q \rho_q^+ \rangle^{(g)} - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q). \end{aligned}$$

Если воспользоваться полученным в пункте б) этого параграфа выражением для функции Грина $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\varepsilon}$ в главном приближении, то из общей формулы следует выражение для $\Delta\Omega$, гарантированное, как мы отмечали ранее, с точностью до $g^2 \sim e^4$ исключительно,

$$\Delta\Omega = \int_0^1 dg \frac{1}{2} \sum_q \left(-\frac{1}{\pi}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} - 1} \operatorname{Im} \frac{\Pi(q, \omega + i\varepsilon)}{1 - g\Pi(q, \omega + i\varepsilon)} - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q).$$

Проинтегрировав по параметру «включения» взаимодействия,

$$\operatorname{Im} \int_0^1 dg \frac{\Pi}{1 - g\Pi} = \operatorname{Im} \ln(1 - \Pi) = \operatorname{Im} \ln(1 - R - iI) = -\operatorname{arctg} \frac{I}{1 - R},$$

и замечая, что при малых значениях аргумента $\operatorname{arctg} \xi = \xi - \xi^3/3 + \dots$ и что величины $I(q, \omega)$ и $R(q, \omega)$ пропорциональны $g \sim \alpha \sim e^2$, мы вправе сохранить только аргумент арктангенса, опустив негарантированные нашим приближением члены порядка α^3 и выше. Тогда

$$\Delta\Omega = - \sum_q \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} - 1} \cdot \frac{I(q, \omega)}{1 - R(q, \omega)} - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q).$$

Так как в выражение для $I(q, \omega)$ входят δ -функции,

$$I(q, \omega) = -\pi \frac{\nu(q)}{V} \sum_p (n_{p+q} - n_p) \delta(\omega + E_{p+q} - E_p),$$

то интеграл по переменной ω снимается ценой появления дополнительного суммирования по импульсу p . Наконец, учитывая, что

$$e^{-E_{p+q}/\theta} \cdot e^{E_p/\theta} - 1 = \frac{n_{p+q}}{1 - n_{p+q}} \cdot \frac{1 - n_p}{n_p} - 1 = \frac{n_{p+q} - n_p}{n_p(1 - n_{p+q})},$$

что функция $R(q, \omega)$ симметрична по аргументу ω и что $N = \sum_p n_p$, получаем окончательно рабочую формулу для дальнейшего расчета $\Delta\Omega$,

$$\Delta\Omega = \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p \left(\frac{n_p(1 - n_{p+q})}{1 - R(q, E_{p+q} - E_p)} - n_p \right).$$

Следуя установившейся при изучении ферми-систем (как идеальных, так и неидеальных) традиции, рассмотрим сначала случай вырожденной системы, т. е. случай $\theta = 0$. Полагая $R = 0$, получаем в первом порядке по $\alpha \sim e^2$ так называемую обменную энергию

$$\Delta\Omega^{(1)}(\theta, V, \mu) \Big|_{\theta=0} = \Delta\Omega_{\text{обм}} = -\frac{1}{2V} \sum_{pq} \nu(q) n_{p+q} n_p.$$

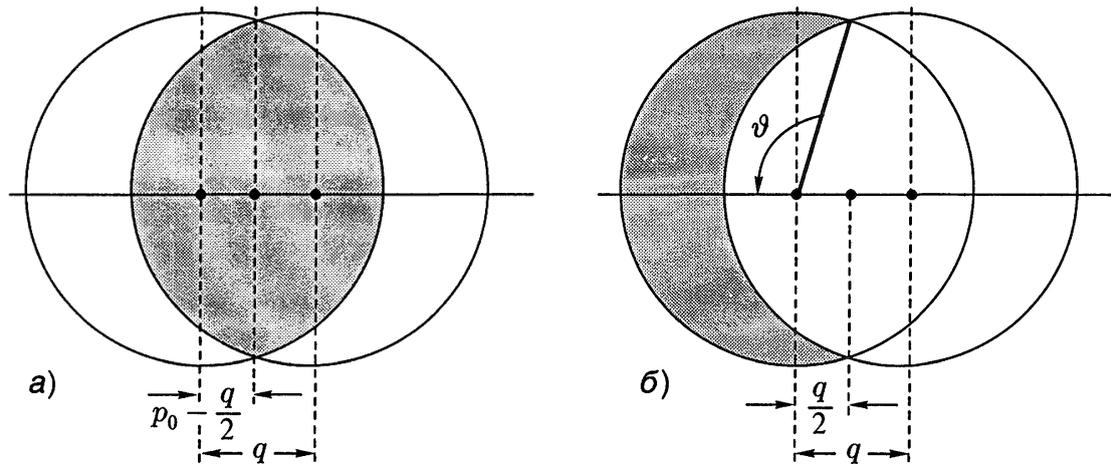


Рис. 64. Области интегрирования по импульсу p при расчете обменной (а) и корреляционной (б) частей термодинамического потенциала Ω в случае $\theta = 0$. Радиусы пересекающихся сфер равны p_0

Оставшаяся часть $\Delta\Omega$, традиционно называемая корреляционной энергией, тогда будет иметь вид

$$\Delta\Omega_{\text{корр}}(\theta, V, \mu) \Big|_{\theta=0} = \Delta\Omega - \Delta\Omega_{\text{обм}} = \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p n_{p+q}(1-n_p) \frac{R(q, E_{p+q} - E_p)}{1 - R(q, E_{p+q} - E_p)},$$

где, полагая заданными величины V и μ (но не N),

$$n_p = \begin{cases} 1 & \text{в случае } p < p_0 = \sqrt{2m\mu}, \\ 0 & \text{в случае } p > p_0 = \sqrt{2m\mu}. \end{cases}$$

Расчет обменной части термодинамического потенциала достаточно элементарен: для этого необходимо знать объем пересечения двух сфер радиуса p_0 , центры которых сдвинуты относительно друг друга на расстояние q (см. рис. 64 а),

$$\frac{1}{V} \sum_p n_{p+q} n_p = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{1}{3} \pi \left(p_0 - \frac{q}{2} \right)^2 \left(3p_0 - \left(p_0 - \frac{q}{2} \right) \right).$$

Подставляя $\nu(q) = 4\pi e^2 \hbar^2 / q^2$ и интегрируя по q в пределах $0 \leq q \leq 2p_0$, получаем

$$\Delta\Omega_{\text{обм}} = -N_0 \frac{3}{2} \alpha_0 \mu = -N_0 \frac{3e^2 k_0}{4\pi},$$

где

$$N_0 = \frac{2}{3} \frac{2Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \mu^{3/2}, \quad \alpha_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{4p_0^2} = \frac{\sqrt{2m} e^2}{2\pi \hbar \sqrt{\mu}}.$$

Прежде чем перейти к расчету корреляционной части потенциала Ω , отметим, что содержащийся в $\Delta\Omega_{\text{корр}}$ член формального разложения порядка α^2 (получающийся при пренебрежении по сравнению с единицей величиной $R(q, E_{p+q} - E_p)$ в знаменателе подынтегрального выражения для $\Delta\Omega_{\text{корр}}$) расходится на нижнем пределе интеграла по модулю q как

$$\alpha_0^2 \int_0 \dots \frac{q^2 dq}{q^4} \sim \alpha_0^2 \frac{1}{q} \Big|_{q \rightarrow 0} = \infty.$$

Это свидетельствует о том, что корреляционная часть $\Delta\Omega$ определяется более сильной асимптотической зависимостью от α_0 , чем α_0^2 , но более слабой, чем α_0 в первой степени. Вид этой зависимости целиком определяется поведением подинтегральной функции в области малых значений q (интеграл по остальной части q даст нерасходящуюся поправку, начинающуюся с α_0^2 , которая нашим главным приближением не гарантирована).

Воспользовавшись полученным в пункте в) этого параграфа выражением для $R(q, E)$,

$$R(q, E_{p+q} - E_p) = \frac{\nu(q)}{V} \sum_{p'} n_{p'} \frac{2(E_{p'+q} - E_{p'})}{(E_{p+q} - E_p)^2 - (E_{p'+q} - E_{p'})^2},$$

проинтегрируем правую часть по углам в пространстве \mathbf{p}' ($d\Omega' = -2\pi dx'$, $x' = \cos \vartheta' = \frac{p'q}{pq}$). Тогда, обозначив $x = \cos \vartheta = \frac{pq}{pq}$, получим

$$R(q, E_{p+q} - E_p) = \nu(q) \frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty p'^2 dp' n_{p'} \frac{m}{2p'q} \ln \left| \frac{1 + \frac{q}{px-p'}}{1 + \frac{q}{px+p'}} \right|.$$

Из этого сложного выражения нам необходимо выделить только главную асимптотику по параметру $\alpha_0 \sim e^2$, которая, как было указано выше, должна предшествовать вкладам, пропорциональным α_0 . Главное асимптотическое поведение $\Delta\Omega_{\text{корр}}$ от α_0 определяет интегрирование в области малых значений q (интегрирование по остальной области приведет к появлению членов, пропорциональных α_0^2 , не гарантированных нашим приближением), в которой

$$\ln \left(1 + \frac{q}{px \mp p'} \right) \cong \frac{q}{px \mp p'}$$

и

$$R(q, E_{p+q} - E_p) \cong -\nu(q) \frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3} m \int_0^\infty n_{p'} \frac{p'^2 dp'}{p'^2 - p^2 x^2}.$$

В случае $\theta = 0$ интегрирование по p' ограничено интервалом $0 \leq p' \leq p_0$, и мы получаем

$$R(q, E_{p+q} - E_p) \cong -\nu(q) \frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^3} m p_0 \left(1 + \frac{1}{2} x \frac{p}{p_0} \ln \left| \frac{1 - \frac{px}{p_0}}{1 + \frac{px}{p_0}} \right| \right).$$

Далее, так как при $\theta \rightarrow 0$

$$n_p(1 - n_p) \rightarrow 0, \quad -\frac{\partial n_p}{\partial E_p} = \frac{n_p(1 - n_p)}{\theta} \rightarrow \delta(E_0 - \mu) = \frac{m}{p_0} \delta(p - p_0), \quad n_{p_0} = \frac{1}{2},$$

то при малых значениях q

$$n_p(1 - n_{p+q}) = n_p(1 - n_p) - n_p \frac{\partial n_p}{\partial E_p} \frac{pq}{m} x + \dots = \frac{p}{p_0} \frac{qx}{2} \delta(p - p_0) + \dots$$

Из всей области интегрирования по переменной $x = \cos \vartheta$ (см. рис. 64 б) выделим часть интеграла в пределах $-q/(2p_0) \leq x \leq 0$, которая пропорциональна интервалу

интегрирования $q/(2p_0)$. Этот фрагмент общего интеграла по q можно опустить, так как он создает комбинацию

$$\alpha_0^2 \int_0^{\dots} \frac{q^2 dq}{q^2 + \lambda^2} \sim \alpha_0^2, \quad \lambda^2 = -q^2 R(q, E_{p_0+q} - E_{p_0}) \sim \alpha_0,$$

вклад от которой в $\Delta\Omega_{\text{корр}}$ не гарантирован в рассматриваемом нами приближении по α_0 . Оставшаяся структура интеграла по q , определяющая характер зависимости $\Delta\Omega_{\text{корр}}$ от параметра α_0 приобретает вид

$$\alpha_0^2 \int_0^{q_0} \frac{q dq}{q^2 + \lambda^2} = -\alpha_0^2 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{\lambda^2}{q_0^2 + \lambda^2} \cong -\alpha_0^2 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{\lambda^2}{q_0^2} \sim -\alpha_0^2 \ln \alpha_0.$$

Заметим, что так как $\lambda^2 \sim \alpha_0$, верхний предел $q = q_0$ в этом интеграле можно выбрать достаточно произвольно, так как верхняя подстановка все равно дает негарантированный вклад в $\Delta\Omega_{\text{корр}}$, пропорциональный $\alpha_0^2 \ln q_0$. Кроме того, мы можем в рамках принятого приближения распорядиться по своему усмотрению фактором перед параметром α_0 , входящим в комбинацию λ^2 в знаменателе выражения для $\Delta\Omega_{\text{корр}}$. Положим $q_0 = 2p_0$ и в соответствии со сказанным выше опустим в λ^2 часть, зависящую от x . Тогда, собирая все вместе, получим

$$\Delta\Omega_{\text{корр}} \cong -\frac{V(4\pi)^2 m}{(2\pi\hbar)^9} (4\pi e^2 \hbar^2)^2 p_0^3 \int_0^1 dx \cdot x \left(1 + \frac{x}{2} \ln \left| \frac{1-x}{1+x} \right| \right) \int_0^{2p_0} \frac{q dq}{q^2 + 4\pi e^2 \hbar^2 \frac{8\pi m}{(2\pi\hbar)^3} p_0}.$$

Интеграл по переменной x непосредственно берется и определяет фактор $(1 - \ln 2)/3$, а структура интеграла по q была уже нами рассмотрена выше. Используя введенные нами величины $N_0(\mu)$, $p_0(\mu)$ и α_0 , получаем окончательно, сохраняя лишь гарантированную асимптотику по параметру $\alpha_0 \sim e^2$,

$$\Delta\Omega_{\text{корр}} = N_0 2(1 - \ln 2) \mu \alpha_0^2 \ln \alpha_0 + O(\alpha_0^2).$$

Интересно заметить, что несмотря на то что исследование вырожденного ферми-газа, сопоставляемого с электронным газом в металлах, было начато еще в 1926 г., приведенное выше выражение для $\Delta\Omega_{\text{корр}}$ было впервые получено спустя 30 лет в работе М. Гелл-Манна и К. Бракнера 1957 г.

Переходя к рассмотрению низкотемпературного поведения термодинамического потенциала при $\theta \ll \mu$, заметим, что принятое выше традиционное разделение величины $\Delta\Omega$ на «обменную» и «корреляционную» части не представляется целесообразным: формальные поправки к ним по $(\theta/\mu)^2$ (см. т. 2, § 2, п. в)) расходятся. Это обнаруживается сразу при попытке написать первую фермиевскую поправку к обменной энергии, а так как получающийся коэффициент при α_0 $(\theta/\mu)^2$ оказывается расходящимся, то это означает, что реальная зависимость коэффициента при $(\theta/\mu)^2$ от параметра α_0 должна быть более сильной, чем первая его степень. В связи с этим при определении температурной поправки к $\Delta\Omega$ ($\theta = 0$, V , μ) мы вправе понизить уровень асимптотической точности по параметру α_0 со второй до первой его степени включительно,

$$\Delta\Omega = \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p \left(\frac{n_p(1 - n_{p+q})}{1 - R(q, E_{p+q} - E_p)} - n_p \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p \frac{n_p n_{p+q}}{1-R} + \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p n_p \frac{R}{1-R} \cong \\
&\cong -\frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p \frac{n_p n_{p+q}}{1-R(q, E_{p+q} - E_p)}.
\end{aligned}$$

Более того, в этом же приближении мы можем заменить стоящую в знаменателе функцию $R(q, E_{p+q} - E_p)$ на $R(q, 0)$, так как величина

$$\frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p n_p n_{p+q} \left(\frac{1}{1-R(q, E_{p+q} - E_p)} - \frac{1}{1-R(q, 0)} \right)$$

имеет структуру интеграла

$$\int_0^{\dots} dq \int dp n_p n_{p+q} \frac{q^2 \alpha_0^2 (f(0) - f(x))}{(q^2 + \alpha_0 f(x))(q^2 + \alpha_0 f(0))},$$

который сходится по q и имеет порядок $\alpha_0^{3/2}$, т. е. слабее удерживаемой первой степени по α_0 . Поэтому с точностью до α_0 включительно имеем,

$$\Delta\Omega \cong -\frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p \frac{n_p n_{p+q}}{1-R(q, 0)},$$

где для величины $R(q, 0)$ мы можем воспользоваться полученным в пункте в) данного параграфа выражением $R(q, 0) = -\hbar^2 \kappa^2 / q^2$. Тогда, полагая $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1$, $\mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{p}_2$, получаем

$$\Delta\Omega = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} n_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_2} \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|^2 + \hbar^2 \kappa^2} = -N_0 \frac{3k_0 e^2}{4\pi} \frac{1}{p_0^4} \int_0^\infty n_{p_1} dp_1 \int_0^\infty n_{p_2} dp_2 \mathcal{F}(p_1, p_2),$$

где

$$\mathcal{F}(p_1, p_2) = p_1 p_2 \ln \frac{(p_1 + p_2)^2 + \hbar^2 \kappa^2}{(p_1 - p_2)^2 + \hbar^2 \kappa^2} = \mathcal{F}(p_2, p_1).$$

Заметим кстати, что если бы мы аналогичным образом обработали выражение для $\Delta\Omega_{\text{обм}}$, то получили бы аналогичные выражения с функцией $\mathcal{F}(p_1, p_2)$, в которой под знаком логарифма отсутствуют слагаемые $\hbar^2 \kappa^2$.

Интересуясь только первой температурной поправкой к $\Delta\Omega$, достаточно воспользоваться выражением для

$$\kappa^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n_0}{\partial \mu},$$

взятым для случая $\theta = 0$, так как вследствие самой конструкции формулы для $\Delta\Omega$ температурная поправка к функции $R(q, 0)$ окажется существенной лишь в следующих по α_0 членах асимптотического разложения потенциала $\Delta\Omega$. Поправки же, связанные с температурным разложением сферы Ферми, определяются с помощью известной процедуры (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. в))

$$\int_0^\infty n_p F(p) dp = \int_0^{p_0} F(p) dp + \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{\theta}{\mu} \right)^2 p_0^3 \left(\frac{\partial F(p)}{\partial p} \frac{1}{p} \right)_{p=p_0} + \dots,$$

$$\int_0^{\infty} n_{p_1} dp_1 \int_0^{\infty} n_{p_2} dp_2 \mathcal{F}(p_1, p_2) =$$

$$= \int_0^{p_0} dp_1 \int_0^{p_0} dp_2 \mathcal{F}(p_1, p_2) + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 p_0^3 \int_0^{p_0} dp \left(\frac{\partial}{\partial p_1} \frac{\mathcal{F}(p_1, p)}{p_1}\right)_{p_1=p_0} + \dots,$$

где $p_0 = \sqrt{2m\mu}$ и мы учли, что $\mathcal{F}(p_1, p_2) = \mathcal{F}(p_2, p_1)$.

Выражение для $\Delta\Omega$ в случае $\theta = 0$ в первом по α_0 порядке совпадает с вычисленной нами обменной энергией $\Delta\Omega_{\text{обм}}$, температурную же поправку легко определить, воспользовавшись написанными выше формулами. Выполняя несложные действия и ограничиваясь точностью не выше первой степени по параметру α_0 , получаем

$$\Delta\Omega \cong \Delta\Omega_{\text{обм}} - N_0 \frac{3k_0 e^2}{4\pi} \left(2 + \frac{1}{2} \ln \alpha_0\right) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2,$$

откуда, окончательно с точностью до α_0 включительно и в первом порядке по $(\theta/\mu)^2$ следует для всего термодинамического потенциала

$$\Omega \cong \Omega_{\text{ид}} - N_0 \frac{3}{2} \alpha_0 \mu \left(1 + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 \left(2 + \frac{1}{2} \ln \alpha_0\right)\right),$$

где $\Delta\Omega_{\text{ид}}$ — потенциал идеального ферми-газа в том же приближении по параметру $(\theta/\mu)^2$

$$\Delta\Omega_{\text{ид}} \cong -N_0 \frac{2}{5} \mu \left(1 + \frac{5}{8} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2\right).$$

Пересчитаем теперь полученные в переменных θ, V, μ результаты к имеющим практическое использование переменным θ, V, N (или θ, V, n , где $n = N/V$). Для этого прежде всего необходимо разрешить термодинамическое соотношение

$$N = -\frac{\partial\Omega(\theta, V, \mu)}{\partial\mu}$$

относительно химического потенциала, представив его в виде $\mu = \mu(\theta, V, N) = \mu(\theta, n)$. В случае $\theta = 0$, учитывая полученные результаты для

$$\Delta\Omega(\theta, V, \mu) = \Delta\Omega_{\text{обм}}(\theta, V, \mu) + \Delta\Omega_{\text{корр}}(\theta, V, \mu)$$

и зависимость величин N_0 и α_0 от μ , получаем после несложных операций дифференцирования $\Delta\Omega$ по μ с обусловленной принятым приближением точностью до $\alpha^2 \sim e^4$

$$\mu(\theta, n) \Big|_{\theta=0} = \varepsilon_F (1 - 2\alpha_F + 2\alpha_F^2 (1 - \ln 2) \ln \alpha_F) + O(\alpha_F^2),$$

где

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad \alpha_F = \frac{\kappa_{TF}^2}{4k_F^2} = \frac{m e^2}{\pi \hbar^2 k_F}.$$

В случае низких температур, когда $\theta \ll \varepsilon_F$, в качестве $\Omega(\theta, V, \mu)$ используется выражение, полученное нами с точностью до членов, пропорциональных e^2 включительно.

Дифференцируя это выражение по μ и разрешая полученное соотношение относительно химического потенциала, получаем

$$\mu(\theta, n) = \varepsilon_F \left(1 - 2\alpha_F - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 + \frac{\pi^2}{24} \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 \alpha_F \right) + o(\alpha_F).$$

Располагая этим результатом, достаточно просто рассчитать свободную энергию низкотемпературного ферми-газа, являющуюся характеристической функцией в переменных θ, V, N . Учитывая замечание, приведенное в гл. 3, § 1, п. в), согласно которому

$$\Delta\Omega(\theta, V, \mu(\theta, V, N)) = \Delta\mathcal{F}(\theta, V, N),$$

и

$$\Omega_{\text{ид}}(\theta, V, \mu(\theta, V, N)) + \mu(\theta, V, N) \cdot N = \mathcal{F}_{\text{ид}}(\theta, V, N),$$

получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\theta, V, N) &= \Omega(\theta, V, \mu(\theta, V, N)) + \mu(\theta, V, N) \cdot N = \mathcal{F}_{\text{ид}}(\theta, V, N) + \Delta\mathcal{F}(\theta, V, N) = \\ &= N \left[\frac{3}{5} \varepsilon_F - \frac{\pi^2}{4} \varepsilon_F \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 - \frac{3}{2} \varepsilon_F \alpha_F - \frac{\pi^2}{4} \varepsilon_F \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 \alpha_F \left(1 + \frac{1}{2} \ln \alpha_F \right) \right] + O(\alpha_F^2). \end{aligned}$$

При исследовании высокотемпературного поведения системы в случае $\theta \gg \varepsilon_F$ вместо того, чтобы в исходную формулу для $\Delta\Omega$ подставлять предельные классические выражения для n_p и n_{p+q} и проводить снова все математические операции, воспользуемся установленными в гл. 3, § 2, п. в) дисперсионными соотношениями, которые в данном случае $A = \rho_q$, $B = A^+ = \rho_q^+$ приобретают вид

$$\text{Re} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\text{Im} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon}}{E - \omega}.$$

Так как в классическом пределе $e^{\omega/\theta} - 1 \rightarrow \omega/\theta$, то

$$\begin{aligned} \langle \rho_q^+ | \rho_q \rangle &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} - 1} \text{Im} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon} \rightarrow \\ &\rightarrow -\frac{\theta}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\text{Im} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{\omega+i\varepsilon}}{\omega} = -\theta \text{Re} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{0+i\varepsilon}, \end{aligned}$$

откуда следует для части внутренней энергии $\mathcal{E} = \langle H_0 + H_1 \rangle = \mathcal{E}_{\text{ид}} + \Delta\mathcal{E}$, учитывающей взаимодействие частиц

$$\Delta\mathcal{E} = \langle H_1 \rangle = \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q) \left(\frac{\langle \rho_q^+ | \rho_q \rangle}{N} - 1 \right) = -\frac{N}{2V} \sum_q \nu(q) \left(\frac{\theta}{N} \langle \langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle \rangle_{0+i\varepsilon} + 1 \right).$$

Так как согласно исследованиям пункта в) этого параграфа $I(q, 0) = 0$ и $R(q, 0) = -\hbar^2 \kappa^2 / q^2$, где в классическом случае $\kappa^2 = \kappa_D^2 = 4\pi e^2 n / \theta$, то, учитывая $\nu(q) = 4\pi e^2 \hbar^2 / q^2$ и беря интеграл по \mathbf{q} , получаем сразу в переменных θ, V, N

известный результат (см. т. 2, гл. 3, § 1, п. д))

$$\begin{aligned}\Delta \mathcal{E}(\theta, V, N) &= -\frac{N}{2V} \sum_q \nu(q) \frac{\hbar^2 \kappa^2}{q^2 + \hbar^2 \kappa^2} = \\ &= -\frac{N}{2} \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi e^2 \hbar^2 \cdot \hbar^2 \kappa^2 \int_0^\infty \frac{dq}{q^2 + \hbar^2 \kappa^2} = -\frac{N}{2} e^2 \kappa = -N \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3.\end{aligned}$$

Для свободной энергии согласно общей процедуре (см. т. 2, гл. 3, § 1, п. б))

$$\begin{aligned}\Delta \mathcal{F}(\theta, V, N) &= \mathcal{F}(\theta, V, N) - \mathcal{F}_{\text{ид}}(\theta, V, N) = \\ &= \int_0^1 \frac{dg}{g} \langle g H_1 \rangle^{(g)} = \int_0^1 \frac{dg}{g} g^{3/2} \left(-N \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3 \right) = -N \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3,\end{aligned}$$

для сдвига потенциала омега

$$\Delta \Omega(\theta, V, \mu) = \Delta \mathcal{F}(\theta, V, N(\theta, V, \mu)) = -N^{3/2}(\theta, V, \mu) \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3,$$

где

$$N(\theta, V, \mu) = e^{\mu/\theta} \frac{2V(2\pi m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3},$$

и, наконец, для химического потенциала

$$\mu(\theta, n) = \frac{\partial(\mathcal{F}_{\text{ид}}(\theta, V, N) + \Delta \mathcal{F}(\theta, V, N))}{\partial N} = \mu_{\text{ид}}(\theta, n) - \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3.$$

Уравнение состояния классического электронного газа $p = p(\theta, v)$ можно получить, дифференцируя свободную энергию

$$p(\theta, v) = -\frac{\partial(\mathcal{F}_{\text{ид}}(\theta, V, N) + \Delta \mathcal{F}(\theta, V, N))}{\partial V} \cong \frac{\theta}{v} - \frac{1}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\theta v^3}} \cdot e^3,$$

а можно воспользоваться соотношением $\Omega = -pV$. Тогда

$$p(\theta, V, \mu) = -\frac{\Omega_{\text{ид}}(\theta, V, \mu) + \Delta \Omega(\theta, V, \mu)}{V} = \frac{\theta}{V} N(\theta, V, \mu) - \frac{\Delta \Omega(\theta, V, N(\theta, V, \mu))}{V}.$$

Так как с точностью до первой поправки по e^3

$$N(\theta, V, \mu) = N(\theta, V, \mu_{\text{ид}} + \Delta \mu) \cong N \left(1 - \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3 \right),$$

то в том же приближении вновь получаем

$$\begin{aligned}p(\theta, V, \mu(\theta, V, N)) &= p(\theta, n) \cong \\ &= \frac{\theta}{V} N - \frac{\theta}{V} N^{3/2} \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3 + \frac{2}{3} \frac{\theta}{V} N^{3/2} \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3 = \theta n - \frac{1}{3} \sqrt{\frac{\pi n^3}{\theta}} e^3.\end{aligned}$$

Аналогичную процедуру можно осуществить и в случае $\theta \ll \varepsilon_F$. Учитывая, что $\varepsilon_F \sim V^{-2/3}$, $\alpha_F \sim V^{1/3}$ и беря производную по V от свободной энергии, рассчитанной нами ранее с точностью до α_F^1 включительно, получаем

$$p(\theta, n) = -\frac{\partial \mathcal{F}(\theta, V, N)}{\partial V} \cong \frac{2}{5} \varepsilon_F \left\{ 1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 - \frac{5}{4} \alpha_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 [7 + 3 \ln \alpha_F] \right) \right\}.$$

Особый интерес составляет калорическое уравнение состояния системы $C_{VN} = \partial \mathcal{E}(\theta, V, N) / \partial \theta$. Так как в области $\theta \ll \varepsilon_F$ температурная поправка к свободной энергии пропорциональна $(\theta/\varepsilon_F)^2$, то энтропия системы $S = -\partial \mathcal{F} / \partial \theta$ пропорциональна первой степени θ , и в силу этого совпадает с теплоемкостью $C_{VN} = \theta \partial S / \partial \theta$. Имеем,

$$C_{VN}(\theta, V, N) = S(\theta, V, N) = -\frac{\partial \mathcal{F}(\theta, V, N)}{\partial \theta} \cong N \frac{\pi^2}{2} \frac{\theta}{\varepsilon_F} \left(1 + \alpha_F \left(1 + \frac{1}{2} \ln \alpha_F \right) \right).$$

Линейная зависимость теплоемкости C_{VN} от температуры свидетельствует о том, что учет кулоновского взаимодействия электронов сохраняет специфический для нормальных ферми-систем частично-дырочный характер квазичастичных возбуждений (см. т. 2, гл. 2, § 2, п. в)). Так как теплоемкость вырожденного идеального ферми-газа в том же приближении по температуре пропорциональна массе частиц m ,

$$(C_{VN})_{ид} \cong N \frac{\pi^2}{2} \frac{\theta}{\varepsilon_F} = N \frac{\pi^2}{\hbar^2} \left(\frac{1}{3\pi^2 n} \right)^{2/3} m \theta,$$

то появление в теплоемкости поправки на кулоновское взаимодействие частиц можно интерпретировать как перенормировку исходной массы электрона m на ее эффективную величину m^* , характеризующую этот квазичастичный спектр возбуждений в области температурного размытия сферы Ферми,

$$C_{VN}(\theta, V, N) \cong N \frac{\pi^2}{\hbar^2} \left(\frac{1}{3\pi^2 n} \right)^{2/3} m^* \theta,$$

где

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \alpha_F \left(1 + \frac{1}{2} \ln \alpha_F \right).$$

В классическом пределе $\theta \gg \varepsilon_F$, опуская квантовые поправки, имеем для теплоемкости

$$C_{VN}(\theta, V, N) = \frac{\partial \mathcal{E}(\theta, V, N)}{\partial \theta} \cong N \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{3}{2} \theta - \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3 \right) = N \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\theta^3 v}} e^3 \right).$$

Попытаемся, как это мы сделали в низкотемпературном пределе, и в этом случае приписать происхождение части внутренней энергии $\Delta \mathcal{E}$ не взаимодействию частиц друг с другом, а изменению массы частиц системы. С элементарной физической точки зрения эта величина представляет собой разность электростатической энергии системы с экранированным $\tilde{\Phi}(R)$ и собственной кинетической энергии частиц, так что энергию отдельной частицы системы можно условно представить как

$$E_{эфф}(p) = \frac{p^2}{2m} \left(1 - \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} e^3 \left(\frac{2m}{p^2} \right)_{эфф} \right) = \frac{p^2}{2m} \cdot \frac{m}{m^*}.$$

Тогда для средней эффективной массы одетой «поляризационным облаком» частицы с импульсом, близким к значению $p_0 = \sqrt{3m\theta}$, в классическом случае получим

$$\frac{m}{m^*} \cong 1 + \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\theta^3 v}} e^3.$$

Располагая исследованной нами выше функцией Грина $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$ в приближении, которое мы называем главным (или приближением «одного q »), можно не только рассчитать, как это мы уже сделали, все термодинамические свойства электронного газа в металле, исследовать характерные спектральные свойства системы, но и рассмотреть вопрос о характере зависимости от $R = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ парной корреляционной функции $F_2(R)$ в соответствующем длинноволновом приближении. Для этого можно воспользоваться полученной в гл. 3, § 1, п. а) связью величины $F_2(R) - 1$ с фурье-образом функции $v(\langle \rho_q^+ \rho_q \rangle / N - 1)$, в которой величина $\langle \rho_q^+ \rho_q \rangle$ выражается через мнимую часть функции Грина $\langle\langle \rho_q | \rho_q^+ \rangle\rangle_{E+i\epsilon}$, но проще связать $F_2(R)$ с вариационной производной от уже исследованной нами свободной энергии по потенциалу взаимодействия $\Phi(R)$ (см. гл. 1, § 4, п. д)). Так как для системы заряженных частиц, помещенных в компенсирующую положительно заряженную среду размазанных ионов решетки,

$$\langle H_1 \rangle = N \cdot \frac{1}{2v} \int \Phi(R)(F_2(R) - 1) d\mathbf{R},$$

то для парной корреляционной функции имеем

$$F_2(R) - 1 = \frac{2v}{N} \frac{\delta \langle H_1 \rangle}{\delta \Phi(R)}.$$

Чтобы не перегружать рассмотрение весьма громоздкими расчетами, рассмотрим случай $\theta = 0$ и классический предел $\theta \gg \epsilon_F$. Заметим сразу, что ввиду того что

$$\nu(q) = \int \Phi(R) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} d\mathbf{R},$$

вариация по $\Phi(R)$ эквивалентна в варьируемых выражениях замене величины $\nu(q)$ на экспоненту $e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}$.

Далее, так как в случае $\theta = 0$

$$\Delta\Omega(\theta, V, \mu) = \int_0^1 \frac{dg}{g} \langle g H_1 \rangle^{(g)} = \Delta\Omega_{\text{обм}} + \Delta\Omega_{\text{корр}} = \Delta\mathcal{E}_{\text{обм}} + \int_0^1 \frac{dg}{g} g^2 \Delta\mathcal{E}_{\text{корр}},$$

то ввиду того, что $\Delta\Omega_{\text{корр}} \sim \alpha^2 \ln \alpha$, в соответствии с интегралом по g во втором слагаемом имеем

$$\Delta\Omega_{\text{корр}} \cong \frac{1}{2} \Delta\mathcal{E}_{\text{корр}}.$$

Варьируя обменную часть $\Delta\Omega_{\text{обм}} = \Delta\mathcal{E}_{\text{обм}}$, пропорциональную первой степени α , получаем, как это уже отмечалось в гл. 1, § 4, п. д), результат для парной корреляционной функции идеального ферми-газа: так как

$$\frac{\delta \Delta\mathcal{E}_{\text{обм}}}{\delta \Phi(R)} = -\frac{1}{2V} \sum_{pq} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} n_{p+q} n_p = -\frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \sum_p n_{p+q} n_p = -\frac{1}{2} |F_1(R)|^2,$$

то, умножая на $2v^2/V = 2v/N$, получаем

$$F_2(R)_{\text{обм}} = 1 - \frac{1}{2}|F_1(R)|^2 = F_2(R)_{\text{ид}},$$

где в случае $\theta = 0$

$$F_1(R) = \frac{1}{N} \sum_p n_p e^{i p R} = \frac{3}{(k_F R)^3} (\sin k_F R - k_F R \cos k_F R)$$

(отличие в виде множителя $1/2$ перед вторым слагаемым в формуле для $F_2(R)_{\text{ид}}$ от результата, полученного с помощью прямого расчета $F_2(R)_{\text{ид}}$, связано с тем, что в гл. 1 мы, не суммируя по спиновым состояниям, определяли корреляционную функцию $F_{\uparrow\uparrow}(R)$, зная заранее, что $F_{\uparrow\downarrow}(R) = 1$; в данном же случае у нас вместо $F_{\uparrow\uparrow}$ фигурирует усредненная величина $(F_{\uparrow\uparrow} + F_{\downarrow\downarrow} + F_{\uparrow\downarrow} + F_{\downarrow\uparrow})/4 = 1 + \Delta F_{\uparrow\uparrow}/2$).

Полагая $F_2(R) = F_2(R)_{\text{ид}} + \Delta F_2(R)$, получаем, исключив $F_2(R)_{\text{ид}}$,

$$\Delta F_2(R) = \frac{2v}{N} \frac{\delta 2\Delta\Omega_{\text{корр}}}{\delta\Phi(R)} = \frac{2v}{N} \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \sum_q e^{i q R} \sum_p n_{p+q} (1 - n_p) \frac{R(q, E_{p+q} - E_p)}{1 - R(q, E_{p+q} - E_p)}.$$

Это — знакомое выражение, которое мы подробно рассматривали при расчете $(\Delta\Omega)_{\text{корр}}$ в случае $\theta = 0$, отличие состоит только в том, что вместо $\nu(q) = 4\pi e^2 \hbar^2 / q^2$ теперь стоит $e^{i q R}$. Поэтому, не повторяя всех рассуждений и выкладок, введя безразмерную переменную интегрирования $\xi = q/(2p_F)$ и использовав после интегрирования по углам формулу Эйлера, сразу получим

$$\Delta F_2(R) = -\frac{12\alpha_F}{k_F R} (1 - \ln 2) \int_0^1 \frac{\sin(2k_F R \xi)}{\xi^2 + \alpha_F} \xi^2 d\xi.$$

Интересно отметить, во-первых, что величина $\Delta F_2(R)$ с ростом R не проявляет экспоненциального убывания (как это имеет место в классическом случае) и в этом смысле представляется дальнедействующей, и, во-вторых, эта величина обнаруживает характерные осцилляции, сразу выявляемые при взятии оставшегося интеграла по частям,

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{\xi^2}{\xi^2 + \alpha_F} \sin(2k_F R \xi) d\xi &= -\frac{\cos(2k_F R \xi)}{2k_F R} \frac{\xi^2}{\xi^2 + \alpha_F} \Big|_{\xi=0}^{\xi=1} + \int_0^1 \frac{\cos(2k_F R \xi)}{2k_F R} d\left(\frac{\xi^2}{\xi^2 + \alpha_F}\right) = \\ &= -\left(\frac{1}{1 + \alpha_F} \frac{\cos(2k_F R)}{2k_F R} - \frac{2}{(1 + \alpha_F)^2} \frac{\sin(2k_F R)}{(2k_F R)^2} + \dots\right), \end{aligned}$$

имеющие тот же характер, что и отмеченные нами в пункте г) этой главы осцилляции плотности поляризационного заряда $\Delta\rho(R)$.

Наконец, в заключение данного пункта укажем на возможность с помощью полученного в главном приближении результата для термодинамического потенциала (т. е. с точностью до членов, пропорциональных α и $\alpha \ln \alpha$) расчета (в том же приближении самосогласованного поля) распределения по импульсам частиц ферми-газа с кулоновским взаимодействием $n(p) = \langle a_p^+ a_p \rangle$. Чтобы не перегружать это исследование математическими сложностями, рассмотрим случай $\theta = 0$. Тогда свободная

энергия совпадает с внутренней $\mathcal{E} = \langle H_0 + H_1 \rangle$, и согласно теореме о вариациях свободной энергии (см. гл. 1, § 4, п. д))

$$n(p) = \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta E_p} = \frac{\delta \langle H_0 + H_1 \rangle}{\delta E_p} = n_p + \frac{\delta \langle H_1 \rangle}{\delta E_p},$$

где

$$n_p = n(p)_{\text{ид}} = \begin{cases} 1 & \text{в случае } p < p_F, \\ 0 & \text{в случае } p > p_F. \end{cases}$$

Так как конструкция $\Delta \mathcal{E}_{\text{обм}}$ (первый порядок по α) не содержит явно величины E_p ,

$$\Delta \mathcal{E}_{\text{обм}} = -\frac{1}{2V} \sum_{pq} \nu(q) n_{p+q} n_p,$$

то

$$\frac{\delta \Delta \mathcal{E}_{\text{обм}}}{\delta E_p} = 0.$$

Если еще учесть, что согласно сказанному ранее $\Delta \Omega_{\text{корр}} \cong \frac{1}{2} \Delta \mathcal{E}_{\text{корр}}$, то

$$n(p) \cong n_p + \frac{\delta \Delta \mathcal{E}_{\text{корр}}}{\delta E_p} \cong n_p + \frac{\delta 2 \Delta \Omega_{\text{корр}}}{\delta E_p},$$

где для корреляционной части потенциала Ω мы получили еще не проинтегрированное по импульсам выражение

$$\Delta \Omega_{\text{корр}} = \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \sum_p n_{p+q} (1 - n_p) \frac{R(q, E_{p+q} - E_p)}{1 - R(q, E_{p+q} - E_p)};$$

$$R(q, E_{p+q} - E_p) = \frac{\nu(q)}{V} \sum_{p'} n_{p'} \frac{2(E_{p'+q} - E_{p'})}{(E_{p+q} - E_p)^2 - (E_{p'+q} - E_{p'})^2}.$$

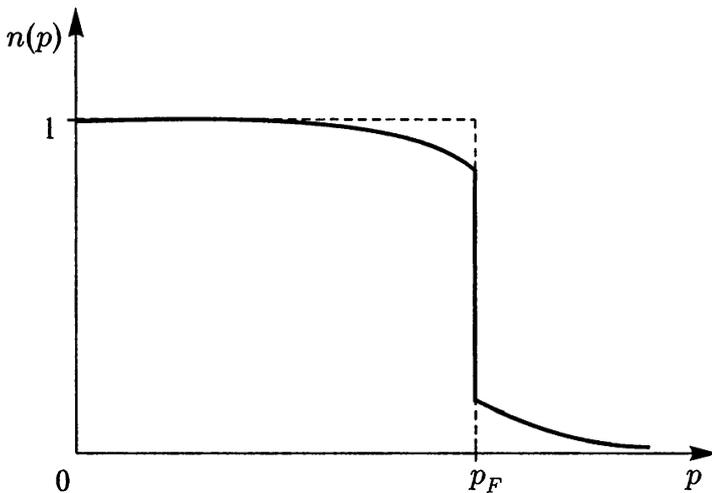


Рис. 65. Динамическое размытие сферы Ферми, связанное с учетом кулоновского взаимодействия частиц системы

Варьирование этого выражения по величине E_p с заданным значением импульса p представляет в идейном отношении несложную проблему, однако в техническом отношении эта операция достаточно громоздка. Внимательно и тщательно осуществляя это варьирование, снимая по одной из сумм по импульсам и производя расчеты оставшихся с точностью до членов порядка α и $\alpha \ln \alpha$, можно в конце концов получить, что в особо интересующей нас области вблизи границы Ферми, когда

$$\frac{p - p_F}{p_F} < \alpha_F \ll 1,$$

средние числа заполнения $n(p) = \langle a_p^+ a_p \rangle$ претерпевают динамическое размытие (см. рис. 65)

$$n(p) \cong \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3}} \alpha_F \cdot \frac{p - p_F}{2p_F} \ln \left| \frac{p - p_F}{2p_F} \right| +$$

$$+ \begin{cases} 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \alpha_F \left[\ln \left(2 \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \alpha_F \right) - C \right] & \text{в случае } p < p_F, \\ 0 - \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \alpha_F \left[\ln \left(2 \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \alpha_F \right) - C \right] & \text{в случае } p > p_F, \end{cases}$$

где постоянная величина

$$C = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\xi^2 + 1} \ln \left(1 - \xi \operatorname{arctg} \frac{1}{\xi} \right) \cong 2,153$$

(в нее можно было бы включить также и $\ln \left(2 \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/3} \right) = \frac{1}{3} \ln \frac{4}{3} \pi \cong 0,471$).

Важно отметить, что это размытие не ликвидирует скачка средних чисел заполнения $n(p)$ в точке $p = p_F$ (как это случилось в сверхпроводящей системе, рассмотренной в гл. 5),

$$\Delta n(p_F) = \lim_{p \rightarrow 0} (n(p_F - p) - n(p_F + p)) \cong 1 + \left(\frac{\pi}{6}\right)^{1/2} \alpha_F (\ln \alpha_F - 1,682),$$

поэтому система с «включенным» кулоновским взаимодействием остается, как и идеальный ферми-газ, нормальной ферми-системой с характерными для нее частично-дырочными возбужденными состояниями (см. пункт г) этого параграфа) и соответствующим этим возбуждениям безщелевым энергетическим спектром.

§ 3. Обсуждение

1. Рассматривая традиционную модель электронного газа в компенсирующем поле кристаллической решетки в качестве пробной системы для демонстрации различных подходов к ее исследованию уже четвертый раз, мы, оставаясь в рамках единого приближения, приходим каждый раз к одним и тем же выводам (преследуя исключительно методические цели, мы при этом ограничивались получением лишь основных результатов, хорошо и достаточно давно известных специалистам в области электронной теории металлов).

В гл. 3, § 3, п. б) мы показали, что это приближение с физической точки зрения эквивалентно характерной для систем с кулоновским взаимодействием частиц власовской процедуре расцепления корреляционных функций, непосредственно связанной с идеологией самосогласованного поля в нулевом его приближении.

В гл. 3, § 6, п. а), анализируя общую формулу для динамической диэлектрической проницаемости, мы показали, что этому же приближению соответствует простейшая аппроксимация спектральной плотности типа плотность-плотность.

В гл. 4, § 3, п. б) на основе обсуждения динамической ситуации в системе частиц с кулоновским взаимодействием их друг с другом мы, используя боголюбовский метод приближенного вторичного квантования, сконструировали точно решаемую модель, учитывающую главные особенности этого взаимодействия.

Наконец, в § 2 данной главы мы рассматриваем ту же систему в качестве показательного примера разумного использования метода двухвременных температурных функций Грина. Выполненное в единой манере, это исследование не только перекрывает упомянутые выше, но дает возможность в духе программы, изложенной в § 1, продолжить это исследование с целью получения дальнейших членов асимптотического разложения по параметру α .

Однако эти уточняющие результаты, требующие огромного труда и тщательной отделки в процессе их окончательного оформления и выяснения конструкций следующих членов асимптотического разложения, имеют скорее лишь теоретическое значение, так как исходная рассматриваемая микроскопическая модель системы электронов в компенсирующем поле кристаллической решетки откровенно примитивна и «очищена» от многих физически существующих факторов, и поэтому она не содержит в себе тех исходных элементов, которые могли бы послужить теоретическому рассмотрению целого ряда совершенно не связанных с «улучшением» главного по кулоновскому взаимодействию приближения интересных и практически наблюдаемых явлений.

2. Проведенное в § 2 исследование, выполненное с использованием двухчастичных функций Грина коммутационного типа, можно было осуществить, взяв в соответствии с рекомендациями § 1 за основу одночастичную функцию Грина $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_\epsilon$ антикоммутационного типа, или соответствующий ей массовый оператор (см. рис. 57 и 58).

В условном диаграммном изображении соответствующая главному приближению замкнутая система уравнений, позволяющая рассчитать одночастичную функцию Грина, представлена на рис. 66 (см. для сравнения уравнения, представленные на рис. 60 и 61, в которых необходимо опустить члены, содержащие $\nu(0)$).

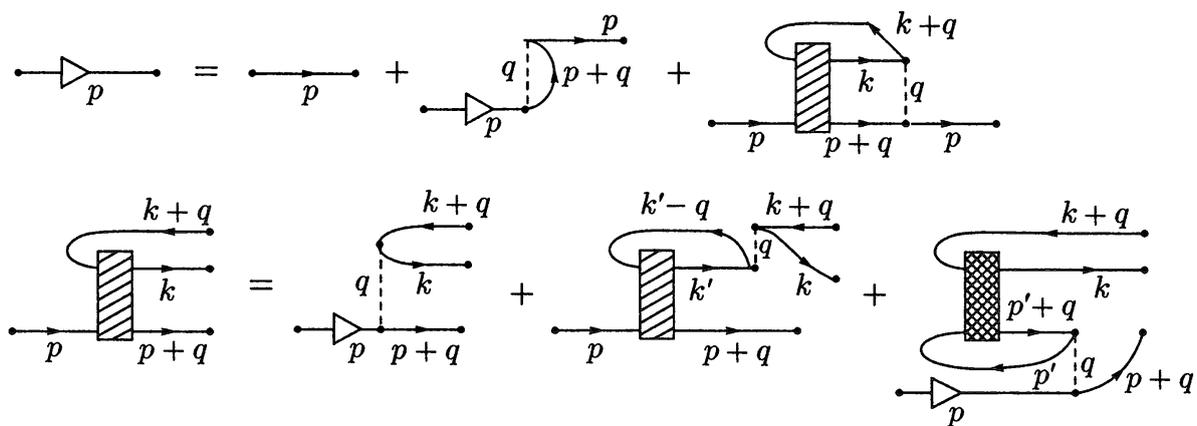


Рис. 66. Замкнутая система уравнений для одночастичной функции Грина $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_\epsilon$ электронного газа в металле в главном приближении

Если решить второе из этих уравнений методом последовательных приближений относительно неприводимой части функции $\langle\langle a_{p+q}^+ a_{k+q} a_p | a_k^+ \rangle\rangle_\epsilon$ и подставить это решение в графическое уравнение для одночастичной функции $\langle\langle a_p | a_p^+ \rangle\rangle_\epsilon$, то мы получим, что соответствующий ей массовый оператор включает в себя сумму простейших поляризационных диаграмм, соответствующих приближению «одного q », как это изображено на рис. 67 (см. для сравнения рис. 37 и 38 в гл. 4, § 3, п. б)).

Совершенно естественно, что, пойдя таким путем, мы получили бы на основе использования формул гл. 3, § 1, связывающих массовый оператор с макроскопическими характеристиками системы, все те результаты, которые были получены нами

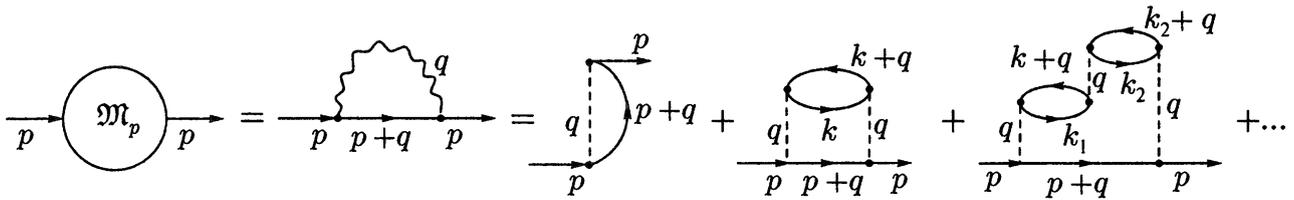


Рис. 67. Структура массового оператора, соответствующего главному приближению для одночастичной функции Грина электронного газа в металле

в предыдущем параграфе. Исключение составляет утерянная по указанным в § 2 причинам информация о видоизменении спектра индивидуальных возбуждений, исследование которого на основе полученного решения для массового оператора естественным образом связано со структурой его реальной и мнимой частей.

Следует отметить, однако, что выражение для эффективной массы квазичастичного возбуждения, существующего в квазистационарном смысле лишь вблизи границы сферы Ферми, в § 2 мы все же получили. Что касается затухания таких возбуждений, то в вырожденном случае (без температурных поправок) оценка его характерного поведения вблизи границы Ферми, $\Gamma_p/\epsilon_F \sim ((p - p_F)/p_F)^2$, на достаточно элементарном уровне была осуществлена в т. 2, § 2, п. в).

3. Остановимся вкратце (без выписывания формул) на программе использования методики расщепления системы уравнений для функций Грина применительно к рассмотрению идеального ферми-газа низкой плотности с короткодействием. В этом, с динамической точки зрения противоположном рассмотренному в § 2 случае мы полагаем, что радиус взаимодействия частиц друг с другом R_0 значительно меньше среднего расстояния между ними, $R_0 \ll a = \sqrt[3]{V/N}$, и что в связи с этим основной вклад в поправки на «неидеальность» системы обусловлены лишь парными столкновениями составляющих ее ферми-частиц. Таким образом, все рассмотрение проблемы с самого начала оказывается идейно связанным с решением квантово-механической задачи о рассеянии частиц друг на друге (см. по этому поводу замечание в гл. 1, § 3, п. п)). В связи с этим вместо неравенства $R_0/a \ll 1$ обычно используют в качестве малого параметра, по которому производят разложение всех поправок к характеристикам идеальной системы, величину $\alpha = p_F a_0 / (\pi \hbar) \ll 1$, где $p_F/\hbar = (3\pi^2)^{1/3}/a$ и a_0 — длина рассеяния, определяющая полное сечение изотропного ($l = 0$) рассеяния частиц друг на друге $\sigma_0 = 4\pi a_0^2$ в пределе $|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2| \rightarrow 0$.

При отборе наиболее существенных в данном приближении вкладов от диаграмм ряда теории возмущений следует учитывать два характерных обстоятельства. Во-первых, в каждом порядке необходимо сохранять вклад, содержащий максимально возможное число суммирований по несовпадающим аргументам фурье-образа потенциала взаимодействия частиц системы $\nu(\mathbf{q})$, т. е. q_1, \dots, q_n , так как каждый случай их совпадения (каждое уменьшение числа сумм по q) соответствует фактору высокоплотностного приближения, рассмотренного нами в § 2 (с этой точки зрения это условие можно назвать приближением всех «различных» q). Во-вторых, каждое спаривание

$$\overline{a_p^+ a_p} = \langle a_p^+ a_p \rangle = n_p$$

ограничивает интегрирование по импульсу \mathbf{p} областью (в пределе $\theta = 0$) $\frac{4}{3}\pi p_F^3 \sim N/V \sim 1/a^3$, т. е. повышает степень параметра низкоплотностного разложения, тогда

как спаривания

$$\overline{a_p a_p^+} = \langle a_p a_p^+ \rangle = 1 - n_p$$

этого эффекта не создают. В пределе $\theta = 0$ это условие означает приоритет линий частиц, несущих импульс $p > p_F$, над линиями дырок, ограничивающих область интегрирования условием $p < p_F$. В диаграммном выражении учет этого обстоятельства приводит к образованию конструкций типа лестниц с одинаково направленными полосьями и перекладинами из линий взаимодействия $\nu(q)/2V$ (см. гл. 4, § 3 п. б), рис. 39 и 40).

Несмотря на ясность физической интерпретации рассматриваемого приближения, его осуществление в порядках α и α^2 , гарантированных при учете двухчастичных взаимодействий, достаточно громоздко, что, в частности, связано со сведением получающихся статистических уравнений к квантово-механической проблеме рассеяния двух одинаковых частиц системы в вакууме. Расчеты всех основных характеристик вырожденного ферми-газа низкой плотности с короткодействием с использованием двухвременных функций Грина двухчастичного типа $\langle \langle a_{p'} a_p | a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ \rangle \rangle_\varepsilon$, непосредственно связанных со статистическим обобщением уравнения для t -матрицы рассеяния и соответствующей модификацией взаимодействия частиц системы друг с другом, и решением замкнутой соответствующим образом системы уравнений для одночастичных функций $\langle \langle a_p | a_p^+ \rangle \rangle_\varepsilon$ и связанного с ними массового оператора было с достаточной подробностью выполнено В. Д. Озриным (см. *Квасников И. А., Озрин В. Д., В. П. Олейников В. П. Двухвременной формализм в теории формальных ферми-систем. Киев. Препр. ИТФ-70-54. 39 с.; Препр. ИТФ-71-84Р. 103 с.*).

Следует отметить, однако, что физическая реализация модели вырожденного ферми-газа с короткодействием достаточно проблематична. Действительно, если реально существующий электронный газ в металлах характеризуется энергией Ферми порядка 10^5 К, то ферми-газ низкой плотности с заведомо не кулоновским взаимодействием (т. е. представляющий разреженный газ из нейтральных ферми-частиц) при сколько-нибудь заметных температурах оказывается невырожденным (т. е. практически классическим), что сразу обесценивает все достаточно сложное квантово-статистическое рассмотрение проблемы, сводя ее к уровню чисто теоретического исследования. Кроме того, хотя приближение «всех разных q » снимает постановочную трудность, отмеченную в гл. I, § 3, п. п) и связанную с использованием решения уравнения для t -матрицы в приближении длины рассеяния (справедливого в пределе малых относительных скоростей взаимодействующих частиц), сохранение этой аппроксимации во всем допустимом диапазоне значений импульсов становится в известной мере спорным.

Исключение составляет, пожалуй, лишь проблема учета взаимодействия электронного газа в металлах с разреженной системой частиц тяжелой примеси (двухкомпонентная квантово-статистическая система), при рассмотрении которой в формализме двухвременных функций Грина (С. С. Кротов) t -матричное приближение оказывается полностью физически оправданным.

Электронный газ в статическом поле случайно расположенных рассеивающих центров

В последней главе данной книги остановимся на исследовании системы, характеризуемой квадратичным по ферми-операторам гамильтонианом. Во-первых, подобная модель имеет непосредственное отношение к теме, представленной в заглавии, и к не связанной с рассеянием электронов на колебаниях решетки (см. подробнее т. 3, гл. 5, § 7, п. в)) проблеме остаточного сопротивления несверхпроводящего металла. Во-вторых, рассматривая эту в постановочной части простую модель, которая согласно декларируемому в гл. 3 заявлению является точно решаемой, мы убедимся, что эта «точная решаемость» весьма условна и практически не реализуема.

§ 1. Введение. Исходные уравнения для одночастичной функции Грина и массового оператора

Постановочная часть рассматриваемой проблемы характерна для исследований явлений переноса легкой компоненты (см. т. 3, гл. 5, § 7) и специализирована на случай, когда эти явления связаны с рассеянием электронов на разреженной (относительно плотности самого электронного газа) системе очень тяжелых (в сравнении с массой электронов) частиц примеси (или дислокаций), которые в «нулевом» приближении полагаются поэтому неподвижными и связанными с кристаллическим ионным остовом (что освобождает нас от рассмотрения динамики двухкомпонентной системы из электронов и подвижных частиц примеси).

Итак, модельная система включает вырожденный электронный газ в компенсирующем поле ионной решетки (N электронов в объеме V), который, в соответствии с исследованиями предыдущей главы, можно в разумном приближении полагать идеальным ферми-газом с некоторым эффективным значением массы каждой его частицы, и систему из N_0 рассеивающих электроны силовых центров ($N_0 \ll N$), потенциал взаимодействия каждого из них с электроном $u(|r|)$ и его фурье-образ

$$u(k) = \int u(r) e^{ikr} dr$$

считается заданным и не зависящим от спинового состояния электрона (простейший случай немагнитной примеси). Тогда потенциал внешнего статического поля $U(\mathbf{r})$, создаваемого всеми частицами примеси, в которое помещен электронный газ, и его

фурье-образ $U(\boldsymbol{\kappa})$ будут иметь вид

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N_0} u(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|),$$

$$U(\boldsymbol{\kappa}) = \int U(\mathbf{r}) e^{i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{1 \leq i \leq N_0} \int u(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) e^{i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{1 \leq i \leq N_0} e^{i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{R}_i} u(\boldsymbol{\kappa}),$$

и исходный гамильтониан H рассматриваемой системы согласно рецептуре, сформулированной в гл. I, § 3, п. и), в представлении вторичного квантования будет иметь квадратичную по ферми-операторам структуру

$$\mathcal{H} = H - \mu N = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} U(\boldsymbol{\kappa}) a_{k+\boldsymbol{\kappa}}^+ a_k,$$

где, как всегда, $\varepsilon_k = E_k - \mu$, $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, суммирование производится по всем значениям $\boldsymbol{\kappa}$ и $k = (\mathbf{k}, \sigma)$, а второе слагаемое в гамильтониане в диаграммном изображении представлено на рис. 1. Так как коммутатор оператора a_k с этим гамильтонианом равен

$$[a_k, \mathcal{H}]_- = \varepsilon_k a_k + \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} U(\boldsymbol{\kappa}) a_{k+\boldsymbol{\kappa}},$$

то уравнение для одночастичной функции Грина $\langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ принимает вид замкнутого относительно этой функции линейного уравнения

$$(\mathcal{E} - \varepsilon_k) \langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \Delta(k - k_0) + \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} U(\boldsymbol{\kappa}) \langle\langle a_{k+\boldsymbol{\kappa}} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}.$$

Несмотря на относительно простую структуру этого уравнения, в общем случае получить его решение не удастся, поэтому будем его исследовать в рамках модифицированной теории возмущений по взаимодействию $U(\boldsymbol{\kappa})$.

Определив функцию Грина нулевого ($U(\boldsymbol{\kappa}) = 0$) приближения

$$\langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} = \frac{\Delta(k - k_0)}{\mathcal{E} - \varepsilon_k},$$

можно представить исследуемое уравнение в виде (см. рис. 68)

$$\langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} + \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} \frac{U(\boldsymbol{\kappa})}{V} \langle\langle a_{k+\boldsymbol{\kappa}} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}.$$

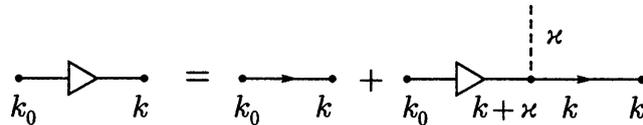


Рис. 68. Диаграммный эквивалент уравнения для функции Грина $\langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ (заметим, что импульсы вдоль линий «частиц» сохраняются только для функций Грина нулевого приближения)

Интересуясь в дальнейшем в основном диагональными по импульсу функциями Грина, введем массовый оператор $\mathfrak{M}(k, k_0; \mathcal{E})$ с помощью соотношения, модифицирующего исходное уравнение для $\langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$

$$(\mathcal{E} - \varepsilon_k) \langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \Delta(k - k_0) + \mathfrak{M}(k, k_0; \mathcal{E}) \langle\langle a_{k_0} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}.$$

Тогда уравнение для исследуемой функции Грина запишется в форме уравнения Дайсона (см. рис. 69)

$$\langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} + \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}^{(0)} \mathfrak{M}(k, k_0; \mathcal{E}) \langle\langle a_{k_0} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}.$$

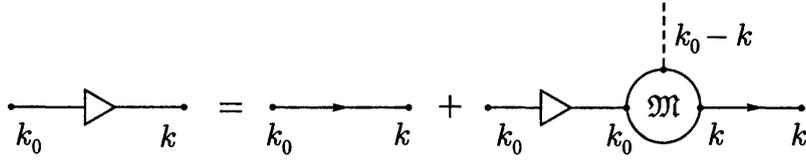


Рис. 69. Графическая интерпретация исходного уравнения для одночастичной функции Грина с помощью массового оператора

Обозначая $\mathfrak{M}(k, k; \mathcal{E}) = \mathfrak{M}_k(\mathcal{E})$, получаем отсюда в случаях $k = k_0$ ($\Delta(k - k_0) = 1$, диагональная функция Грина) и $k \neq k_0$ ($\Delta(k - k_0) = 0$, недиагональная по импульсам функция Грина), выражения через массовый оператор \mathfrak{M}

$$\begin{aligned} \langle\langle a_k | a_k^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k - \mathfrak{M}_k(\mathcal{E})}; \\ \langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= \frac{\mathfrak{M}(k, k_0; \mathcal{E})}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k_0} - \mathfrak{M}_{k_0}(\mathcal{E})}. \end{aligned}$$

Выделяя во втором слагаемом правой части исходного уравнения для $\langle\langle a_k | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$ слагаемые с $k + \kappa \neq k_0$ и записывая все получающиеся члены, а также и само второе слагаемое правой части в терминах массового оператора

$$\begin{aligned} \mathfrak{M}(k, k_0; \mathcal{E}) \langle\langle a_{k_0} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} &= \sum_{\kappa} \frac{1}{V} U(\kappa) \langle\langle a_{k+\kappa} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \\ &= \frac{1}{V} U(k - k_0) \langle\langle a_{k_0} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} + \sum_{\kappa \neq k_0 - k} \frac{1}{V} U(\kappa) \langle\langle a_{k+\kappa} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} = \\ &= \frac{1}{V} U(k - k_0) \langle\langle a_{k_0} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}} + \sum_{\kappa \neq k_0 - k} \frac{1}{V} U(\kappa) \frac{\mathfrak{M}(k + \kappa, k_0; \mathcal{E})}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k+\kappa}} \langle\langle a_{k_0} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}, \end{aligned}$$

получаем, сокращая на $\langle\langle a_{k_0} | a_{k_0}^+ \rangle\rangle_{\mathcal{E}}$, искомое замкнутое уравнение для массового оператора (см. рис. 70):

$$\mathfrak{M}(k, k_0; \mathcal{E}) = \frac{U(k_0 - k)}{V} + \sum_{k_1 \neq k_0} \frac{U(k_1 - k)}{V} \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k_1}} \mathfrak{M}(k_1, k_0; \mathcal{E}).$$

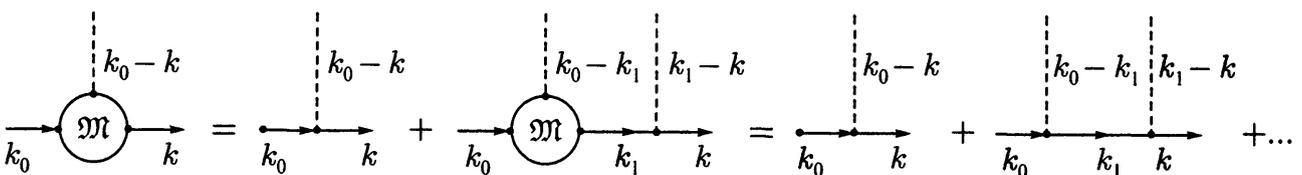


Рис. 70. Диаграммное представление уравнения для массового оператора одночастичной функции Грина и первые члены его разложения по степеням $U(\kappa)/V$

Если ограничиться в интересующем нас массовом операторе $\mathfrak{M}(k, k; \mathcal{E}) = \mathfrak{M}_k(\mathcal{E})$ минимальным приближением — вторым порядком в отношении к потенциалу $U(\mathbf{x})/V$ — и выделить в его запаздывающем варианте, когда $\mathcal{E} = E + i\varepsilon$, действительную и мнимую части,

$$\mathfrak{M}_k(E + i\varepsilon) = M_k(E) - i\Gamma_k(E),$$

то мы придем к приближенным выражениям для действительной $E(k)$ и мнимой $\Gamma(k)$ координат полюса аналитического продолжения на комплексную плоскость энергии запаздывающей функции Грина

$$\langle \langle a_k | a_k^+ \rangle \rangle_{E+i\varepsilon} = G_k^{\text{ret}}(E), \quad E(k) \cong \varepsilon_k + M_k(\varepsilon_k); \quad \Gamma(k) \cong \Gamma_k(\varepsilon_k),$$

где выражения для $M_k(E)$ и $\Gamma_k(E)$ после перехода от суммирования по импульсу к интегрированию (суммы по дискретным переменным σ остаются) можно записать в виде

$$M_k(E) = \frac{U(0)}{V} + \frac{V}{(2\pi)^3} P \int d\mathbf{k}_1 \left| \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)}{V} \right|^2 \frac{1}{E - \varepsilon_{k_1}},$$

$$\Gamma_k(E) = \pi \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}_1 \left| \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)}{V} \right|^2 \delta(E - \varepsilon_{k_1}).$$

§ 2. Усреднение по расположениям центров рассеяния

Ориентируясь на простейший вариант рассмотрения проблемы, положим, что расположение координат центров рассеяния электронов $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_0}$ случайное, т. е. распределение по каждому из \mathbf{R}_i имеет вид

$$w(\mathbf{R}_i) = \frac{1}{V}, \quad i = 1, 2, \dots, N_0.$$

Тогда среднее по расположениям координат \mathbf{R}_i некоторой величины $F(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_0})$ будет иметь вид

$$\tilde{F} = \int_{(V)} F(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_0}) \left(\frac{1}{V} \right)^{N_0} d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_{N_0}.$$

Если слагаемое

$$\frac{U(0)}{V} = \sum_{1 \leq i \leq N_0} \frac{1}{V} u(0) = n_0 u(0),$$

где $n_0 = N_0/V$ — плотность числа рассеивающих центров, отнести к химическому потенциалу системы электронов,

$$\mu' = \mu - n_0 u(0)$$

(этот член, напомним, может зависеть от спинового индекса, но для нас сейчас важно, что в нем $\mathbf{x} = 0$), то во всех оставшихся членах разложения величины $\mathfrak{M}(k, k'; \mathcal{E})$ будут присутствовать экспоненты $e^{i\mathbf{x}_i \mathbf{R}_i}$, образуя средние вида

$$\sum_{i_1, \dots, i_n} \overline{\exp \{ i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})\mathbf{R}_{i_1} + i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\mathbf{R}_{i_2} + \dots + i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_{n-1})\mathbf{R}_{i_n} \}}$$

(в n -м порядке еще присутствует суммирование по промежуточным значениям импульсов k_1, \dots, k_{n-1}). Если $k \neq k_0$, то подобное среднее в силу соотношения

$$\int_{(V)} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{x}\mathbf{R}} d\mathbf{R} = \Delta(\mathbf{x})$$

равно нулю при любом наборе индексов i_1, \dots, i_n из числа $1, 2, \dots, N_0$. Если все индексы при \mathbf{R}_i разные, то это утверждение тоже очевидно. Если же величины \mathbf{R}_i образуют несколько групп одинаковых значений, то для каждой группы в силу написанного выше соотношения будет иметь место закон сохранения импульса, следовательно, он будет выполняться и для всего вклада в структуру оператора \mathfrak{M} , что возможно, как мы уже отметили, только при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$. Таким образом, после усреднения по расположениям примесных центров остается только диагональный по импульсу массовый оператор, так как в случае $k \neq k'$ $\tilde{\mathfrak{M}}(k, k'; \mathcal{E}) = 0$.

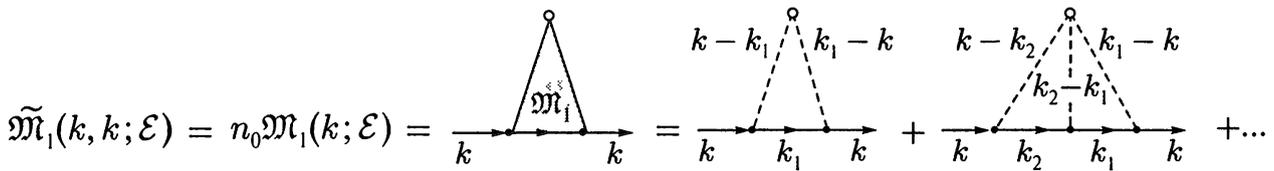


Рис. 71. Часть вкладов в усредненный массовый оператор $\tilde{\mathfrak{M}}_1(k, k; \mathcal{E})$, пропорциональных первой степени плотности примеси $n_0 = N_0/V$. Верхний кружочек в образующихся пирамидах обозначает множитель n_0 , а пунктирные линии взаимодействия, сходящиеся к общей вершине — функции $u(\mathbf{x})$ с аргументом, соответствующим индексу на пунктирной линии

Рассмотрим случай, когда $i_1 = i_2 = \dots = i_n$. Тогда в написанном выше среднем по расположениям \mathbf{R}_i останется только одна экспонента

$$\overline{\exp \{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})\mathbf{R}_{i_1}\}} = \Delta(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}),$$

а сумма по оставшемуся индексу i_1

$$\frac{1}{V} \sum_{1 \leq i_1 \leq N_0} = \frac{N_0}{V} = n_0$$

сворачивается в плотность числа центров рассеяния n_0 . Этот случай соответствует отбору членов в операторе $\mathfrak{M}_k(\mathcal{E})$, описывающих взаимодействие электронов с каждым силовым центром в отдельности (в случае $N_0 = 1$ — с одним силовым центром). Все эти члены дают вклад в усредненное значение $\tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E})$, пропорциональное плотности n_0 . Переобозначим эту часть массового оператора, положив $\tilde{\mathfrak{M}}_1(k, k; \mathcal{E}) = n_0 m_1(k; \mathcal{E})$, где величина $m_1(k; \mathcal{E})$ представляет собой сумму вкладов от диаграмм, представленных на рис. 71, аналитическое выражение которой имеет вид (уже без общего множителя n_0)

$$m_1(k; \mathcal{E}) = \frac{1}{V} \sum_{k_1} u(k_1 - k) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} u(k - k_1) + \\ + \frac{1}{V^2} \sum_{k_1 k_2} u(k_1 - k) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k_1}} u(k_2 - k_1) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k_2}} u(k - k_2) + \dots$$

Введем формальный удельный массовый оператор $m_1(k, k'; \mathcal{E})$, который отличается от $\mathfrak{M}_1(k, k'; \mathcal{E})$ (не усредненного) тем, что во всех прежних выражениях сделана

замена $U \rightarrow u$ и $\mathcal{M} \rightarrow Vm$. Тогда эквивалентное всему выписанному ряду уравнение, последовательные итерации которого воспроизводят весь этот бесконечный ряд, а его полное суммирование соответствует решению этого уравнения, будет иметь вид

$$m_1(k, k'; \mathcal{E}) = u(k' - k) + \frac{1}{V} \sum_{k_1 \neq k'} u(k_1 - k) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k_1}} m_1(k_1, k'; \mathcal{E}),$$

причем $m_1(k; \mathcal{E}) = m_1(k, k; \mathcal{E})$. Это уравнение представляет собой известное квантово-механическое уравнение задачи двух тел (уравнение для t -матрицы рассеяния в нерелятивистской теории), решение которого в простейшем частном случае мы используем в дальнейшем.

В третьем порядке усредненный оператор $\tilde{\mathcal{M}}_k(\mathcal{E})$, кроме пропорциональных n_0 и уже учтенных в $\tilde{\mathcal{M}}_1(k, k; \mathcal{E})$, ненулевых членов не имеет. В четвертом порядке для $\tilde{\mathcal{M}}_k(\mathcal{E})$ начинается учет рассеяния электронов сразу на двух примесных центрах (т. е. возникает необходимость в решении проблемы трех тел в квантовой теории), и также появляется первая неоднозначная по отношению к внешним вершинам диаграмма (см. рис. 72).

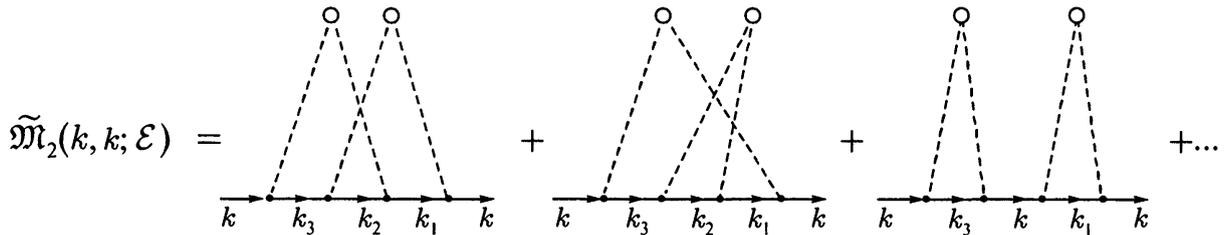


Рис. 72. Схематическое изображение вкладов четвертого порядка в усредненный по расположениям центров рассеяния оператор $\tilde{\mathcal{M}}_k(\mathcal{E})$

В силу процедуры усреднения по \mathbf{R}_1 и \mathbf{R}_2 третий член, изображенный на рис. 72, содержит $\Delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k})$, т. е. вместо трех сумм по \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 и \mathbf{k}_3 содержит только две, а так как каждая из сумм по \mathbf{k} пропорциональна объему V ,

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int f(\mathbf{k}) d\mathbf{k},$$

то третья слагаемая имеет порядок $1/V$ по отношению к первым двум и поэтому в предельном статистическом случае должно быть опущено. По этой же причине в любом порядке по числу внешних «вершин», объединяющих линии взаимодействия $u(\mathbf{k})$, в усредненном массовом операторе останутся только односвязные диаграммные конструкции (или, как говорят, неприводимые диаграммы).

Выясним теперь характер зависимости $\tilde{\mathcal{M}}_2(k, k; \mathcal{E})$ от плотности рассеивающих центров n_0 . Так как в этом случае среди индексов i_1, \dots, i_n имеются две группы совпадающих индексов, например, группа с индексом i_1 и группа с индексом $i_2 \neq i_1$, то в результате взятия среднего по \mathbf{R}_i возникает конструкция

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{i_1, i_2 \\ (i_1 \neq i_2)}} \int_{(V)} \exp \left\{ i \sum_{\alpha_1} \mathbf{k}_{\alpha_1} \mathbf{R}_{i_1} \right\} \frac{d\mathbf{R}_1}{V} \cdot \int_{(V)} \exp \left\{ i \sum_{\alpha_2} \mathbf{k}_{\alpha_2} \mathbf{R}_{i_2} \right\} \frac{d\mathbf{R}_2}{V} = \\ = N_0(N_0 - 1) \Delta \left(\sum_{\alpha_1} \mathbf{k}_{\alpha_1} \right) \cdot \Delta \left(\sum_{\alpha_2} \mathbf{k}_{\alpha_2} \right), \end{aligned}$$

и мы получаем в n -м порядке

$$\begin{aligned} \tilde{\mathfrak{M}}_2^{(n)}(k, k; \mathcal{E}) &= \frac{N_0(N_0 - 1)}{V^2} \times \\ &\times \sum_{\substack{k_1, \dots, k_{n-1} \\ (\sum_{\alpha_1} k_{\alpha_1} = 0; \sum_{\alpha_2} k_{\alpha_2} = 0)}} \frac{1}{V^{n-2}} u(k_1 - k) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k_1}} \dots \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_{k_{n-1}}} u(k - k_{n-1}), \end{aligned}$$

поэтому, полагая в предельном статистическом случае $N_0(N_0 - 1)/V^2 = n_0^2$, получаем, что оператор $\tilde{\mathfrak{M}}_2(k, k; \mathcal{E})$ включает вклады от односвязных конструкций с двумя вершинами, к которым сходятся пунктирные линии взаимодействия $u(x)$ и которые обозначены на рис. 72 кружочками, несущими множитель n_0 , т. е. имеет вид

$$\tilde{\mathfrak{M}}_2(k, k; \mathcal{E}) = n_0^2 m_2(k; \mathcal{E}).$$

Таким образом, продолжая рассмотрение, мы приходим к выводу, что полный усредненный массовый оператор $\tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E})$ можно представить в виде разложения по степеням плотности числа частиц примеси (см. рис. 73)

$$\tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) = n_0 m_1(k; \mathcal{E}) + n_0^2 m_2(k; \mathcal{E}) + n_0^3 m_3(k; \mathcal{E}) + \dots,$$

в котором оператор $m_2(k; \mathcal{E})$ (т. е. «коэффициент» при n_0^2) определяется решением квантово-механической задачи трех тел, оператор $m_3(k; \mathcal{E})$ — четырех тел и т. д.

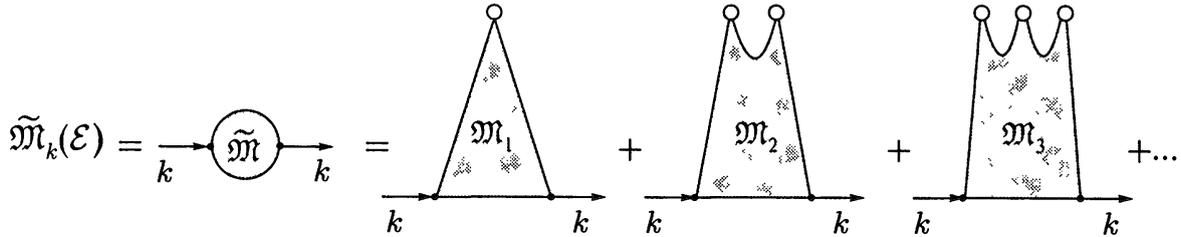


Рис. 73. Схематическое представление структуры разложения усредненного массового оператора $\tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E})$ по степеням $n_0 = N_0/V$. Членам этого разложения соответствуют фигуры, представляющие совокупность односвязных диаграмм, выходящих на одну, две, три и т. д. вершины, обозначенные кружочками (см. также рис. 71 и 72)

Так как аналитически выраженными решениями проблемы трех, четырех и т. д. тел мы не располагаем, то в дальнейшем нам придется вынужденно ограничиться лишь частными сведениями о решении двухтельной квантово-механической задачи (т. е. простейшим частным решением уравнения для t -матрицы рассеяния). Это будет означать, что в массовом операторе будет сохранена зависимость только лишь от первой степени $n_0 = N_0/V$, $\tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) \cong n_0 m_1(k; \mathcal{E})$, что с физической точки зрения соответствует рассмотрению всей проблемы в пределе относительно низкой плотности числа рассеивающих центров $n_0 \ll n$.

В связи с процедурой усреднения по \mathbf{R}_i имеет место следующая лемма: в предельном статистическом случае $V \rightarrow \infty$, $n = N/V = \text{const}$, $n_0 = N_0/V = \text{const}$

$$\overset{\sim}{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \overset{\sim}{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) \stackrel{\text{as}}{\cong} \tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}).$$

Если рассмотреть какой-либо порядок по $u(x)$ в правой части этого выражения, то графически он будет выглядеть, как двухсвязная диаграмма, соединенная линией

частицы с фиксированным значением k , в то время как в левой части кроме диаграмм указанного двухсвязного вида будут и такие, в структуру связных частей которых будет входить линия k , по индексу которой суммирование не производится. Вклад от связной диаграммы в предельном статистическом случае конечен, поэтому вклад от связной диаграммы, внутри которой имеется зафиксированное значение k (т. е. в которой на одну сумму по k_i меньше), будет иметь порядок $1/V$ по отношению к первой. Вклад же от несвязной диаграммы, внутри одной из связных частей которой имеется зафиксированное значение k , будет иметь относительный порядок $1/V^2$ и т. д. Поэтому основной асимптотический порядок левой части обсуждаемого соотношения несут именно те вклады от диаграмм, которые составляют правую его часть.

Согласно лемме, имеет место следующее важное для нас следствие:

$$\begin{aligned} \langle \langle a_k | a_k^+ \rangle \rangle_{\mathcal{E}} &= \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k - \mathfrak{M}_k(\mathcal{E})} \stackrel{\text{as}}{=} \\ &\stackrel{\text{as}}{=} \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \left(1 + \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) + \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k} \tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E}) + \dots \right) = \\ &= \frac{1}{\mathcal{E} - \varepsilon_k - \tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E})}. \end{aligned}$$

Таким образом, нули знаменателя усредненной по случайным расположениям центров рассеяния электронов функции Грина определяются с помощью усредненного по этим центрам массового оператора $\tilde{\mathfrak{M}}_k(\mathcal{E})$.

§ 3. Энергия и затухание одночастичных возбуждений во втором порядке по взаимодействию электронов с частицами тяжелой примеси

В предыдущем рассмотрении мы ради удобства включили член первого порядка U_0/V в химический потенциал электронного газа $\mu' = \mu - U(0)/V$. Учитывая, что $\varepsilon_k = E_k - \mu$, имеем после усреднения по расположениям примесных центров до второго порядка по $u(\kappa)$ включительно для действительной и мнимой частей координаты полюса одночастичной функции Грина на плоскости энергии (т. е. для энергии и затухания одночастичных возбуждений электронного газа) следующие выражения:

$$\begin{aligned} E(k) &\cong \varepsilon_k + \frac{\tilde{U}(0)}{V} + \frac{V}{2\pi^3} P \int dk_1 \frac{\tilde{U}(k-k_1)\tilde{U}(k_1-k)}{V^2} \frac{1}{E_k - E_{k_1}}, \\ \Gamma(k) &\cong \pi \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk_1 \frac{\tilde{U}(k-k_1)\tilde{U}(k_1-k)}{V^2} \delta(E_k - E_{k_1}). \end{aligned}$$

Если учесть очевидные соотношения

$$\begin{aligned} \frac{U(0)}{V} &= n_0 u(0) = n_0 \int u(R) d\mathbf{R}; \\ \delta(E_k - E_{k_1}) &= \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_1^2)\right) = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2k} \delta(k - k_1); \end{aligned}$$

$$\frac{\widetilde{U(k - k_1)U(k_1 - k)}}{V^2} \Big|_{k=k_1} = \left(\frac{U(0)}{V} \right)^2 = n_0^2 u^2(0),$$

то в низшем по $u(0)$ порядке сразу получаем

$$E(k) \cong \varepsilon_k + n_0 u(0); \quad \Gamma(k) \cong \frac{n_0^2 u^2(0) m k}{2\pi \hbar^2}.$$

Этот ответ соответствует известному решению уравнения для t -матрицы рассеяния ($M(k) \cong \text{Re } t_{kk}$; $\Gamma(k) \cong -\text{Im } t_{kk}$) в так называемом приближении длины рассеяния (аппроксимация, оправданная для случаев малых значений \mathbf{k}), которая в данном случае системы рассеивающих центров оказывается равной

$$a_0 = \frac{m}{2\pi \hbar^2} n_0 u(0),$$

а затухание $\Gamma(k)$ соответствует оптической теореме, связывающей эту величину с полным сечением расстояния σ ,

$$\Gamma(k) \cong \frac{k \hbar^2}{2m} \sigma, \quad \sigma = 4\pi a_0^2.$$

Распространяя использованную аппроксимацию на все значения импульса \mathbf{k} , заметим, что второй порядок действительной части массового оператора $M_k(\varepsilon_k)$, если под знак интеграла вместо среднего по расположениям подставить постоянную величину $n_0^2 u^2(0)$, формально расходится на больших значениях переменной интегрирования $k_1 = |\mathbf{k}_1|$. Однако реально дело состоит совсем не так. Действительно, если более подробно расписать стоящее под знаком интеграла среднее,

$$\begin{aligned} \frac{\widetilde{U(\mathbf{x})U(-\mathbf{x})}}{V^2} &= \frac{1}{V^2} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{x}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)} \times \\ &\times \sum_{1 \leq i \leq N_0} \sum_{1 \leq j \leq N_0} \frac{1}{V^2} \iint u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) u(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) d\mathbf{R}_i d\mathbf{R}_j, \end{aligned}$$

то выясняется, что это среднее отлично от нуля только при $\mathbf{x} = 0$. Именно эта точка, благодаря наличию $\delta(k - k_1)$ и входит в затухание $\Gamma(k)$, в то время как в действительную часть $M(k)$ входит интеграл в смысле главного значения, исключаяющий эту точку. Поэтому в рассматриваемом приближении некоррелированных центров рассеяния во второй порядок действительной части массового оператора $M(k)$ вклада не будет совсем.

Ситуация сразу меняется, если мы учтем хотя бы минимальные пространственные корреляции рассеивающих центров. Предположим, что величина $\widetilde{|U(\mathbf{x})|^2}/V^2$ содержит не $\Delta(\mathbf{x})$, а включает некоторую размытую функцию с шириной $k_0 = 1/R_0$. С физической точки зрения это эквивалентно предположению, что среднее $\widetilde{U(\mathbf{r}_1)U(\mathbf{r}_2)}$ не распадается на произведения средних и автоматически при этом превращается в константу

$$\widetilde{U(\mathbf{r}_1)\widetilde{U(\mathbf{r}_2)} = n_0^2 u^2(0) = \text{const},$$

а является некоторой функцией расстояния $R = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$, существенно отличной от нуля на расстояниях $R < R_0$, меньших корреляционного радиуса R_0 . Итак,

положим

$$\widetilde{U}(\mathbf{r}_1)\widetilde{U}(\mathbf{r}_2) = n_0^2\varphi(R) = \Phi(R).$$

Вводя фурье-образ этой корреляционной функции

$$\nu(\boldsymbol{\kappa}) = \nu(\boldsymbol{\kappa}) = \int \Phi(R)e^{-i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{R}} d\mathbf{R},$$

имеем

$$\frac{\widetilde{U}(-\boldsymbol{\kappa})\widetilde{U}(\boldsymbol{\kappa})}{V^2} = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\widetilde{U}(\mathbf{r}_1)\widetilde{U}(\mathbf{r}_2)}{V^2} e^{i\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} = \frac{1}{V} \int \Phi(R)e^{-i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{R}} d\mathbf{R} = \frac{\nu(\boldsymbol{\kappa})}{V}.$$

Поэтому для энергии одночастичного возбуждения $E(k)$ и его затухания $\Gamma(k)$ получаем

$$E(k) \cong \varepsilon_k + n_0 u(0) + \frac{1}{(2\pi)^3} P \int d\mathbf{k}_1 \frac{\nu(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_1|)}{E_k - E_{k_1}},$$

$$\Gamma(k) \cong \pi \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}_1 \nu(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_1|) \delta(E_k - E_{k_1}).$$

Для окончательного расчета этих величин необходимо, используя какие-либо физические соображения, смоделировать функцию $\Phi(R)$. Так как ее характер был уже оговорен выше, то, не прибегая к экзотическим конструкциям типа экранированного кулоновского потенциала $\Phi(R) = \Phi(0)e^{-k_0 R}/(k_0 R)$ (модель Орнштейна—Цернике) или каким-либо ступенчатым вариантам функции $\Phi(R)$, выберем с целью дальнейшего качественного исследования простую экспоненциальную модель (см. рис. 74)

$$\Phi(R) = \Phi(0)e^{-k_0 R}; \quad \nu(\boldsymbol{\kappa}) = \Phi(0) \frac{8\pi k_0}{(k_0^2 + \boldsymbol{\kappa}^2)^2}.$$

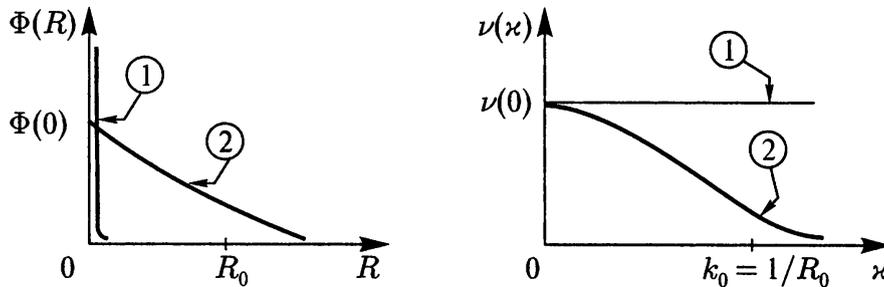


Рис. 74. Корреляционная функция рассеивающих центров $\Phi(R)$ и ее фурье-образ $\nu(\boldsymbol{\kappa})$ в случае отсутствия корреляции (1) и экспоненциального характера ее убывания (2)

Интегрирование приведенной выше функции $\nu(\boldsymbol{\kappa}) = \nu(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_1|)$ по углам в \mathbf{k}_1 -пространстве дает

$$8\pi\Phi(0)k_0 \cdot 2\pi \int_{-1}^1 dx \frac{1}{(k_0^2 + k^2 + k_1^2 - 2kk_1x)^2} =$$

$$= 8\pi\Phi(0) \frac{\pi}{kk_1} \left(\frac{1}{k_0^2 + (k - k_1)^2} - \frac{1}{k_0^2 + (k + k_1)^2} \right),$$

поэтому, учитывая свойство δ -функции, получаем для затухания $\Gamma(k)$ достаточно простой ответ,

$$\Gamma(k) = \frac{\pi}{(2\pi)^3} \cdot 8\pi\Phi(0)k_0 \frac{\pi}{k^2} \left(\frac{k^2}{k_0^2} - \frac{k^2}{k_0^2 + (2k)^2} \right) \frac{2m}{\hbar^2 2k} = \Phi(0) \frac{2m}{\hbar^2 k_0} \frac{2k}{k_0^2 + 4k^2}.$$

В пределе $k \rightarrow 0$ (т. е. в случае $k \ll k_0$) выявляется линейная зависимость $\Gamma(k)$ от импульса частицы,

$$\Gamma(k) \cong \Phi(0) \frac{4mk}{\hbar^2 k_0^3} = \frac{\nu(0)mk}{2\pi\hbar^2}.$$

Эта формула полностью соответствует приближению длины рассеяния, так как $\nu(0) = n_0^2 u^2(0)$. В случае же $k \gg k_0$ затухание уже убывает (см. рис. 75) как

$$\Gamma(k) \cong \Phi(0) \frac{m}{\hbar^2 k_0 k} \rightarrow 0.$$

Для действительной части массового оператора второй порядок по U имеет вид уже сходящегося интеграла (исключая случай $R_0 \rightarrow 0$). Учитывая произведенное нами интегрирование по углам, имеем в случае $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} P \int dk_1 \frac{\nu(|k - k_1|)}{E_k - E_{k_1}} = \frac{1}{\pi} \Phi(0) k_0 \frac{2m}{\hbar^2} 2 \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k_1^2 dk_1}{(k^2 - k_1^2) [(k_0^2 + k^2 + k_1^2)^2 - 4k^2 k_1^2]}.$$

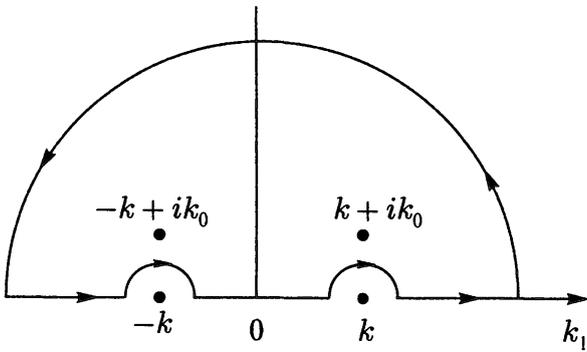


Рис. 76. Расположение полюсов подынтегрального выражения для действительной части массового оператора и эквивалентный интегрированию по действительной оси k_1 замкнутый контур интегрирования на комплексной плоскости k_1

Полюса подынтегрального выражения и целесообразный выбор контура интегрирования представлены на рис. 76.

Подсчитывая вычеты подынтегральной функции относительно полюсов $k_1 = \pm k + ik_0$, получаем (при данном выборе обхода полюсов $k_1 = \pm k$ интеграл мнимой части не содержит)

$$\begin{aligned} E(k) &= \varepsilon_k + n_0 u(0) - \Phi(0) \frac{2m}{\hbar^2 (k_0^2 + 4k^2)} = \\ &= E_k - \mu + n_0 u(0) - \Phi(0) \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} + \\ &+ \Phi(0) \frac{2m}{\hbar^2 k_0^2} \frac{4k^2}{k_0^2 + 4k^2}. \end{aligned}$$

Если отнести не зависящие от k^2 члены правой части этого выражения к сдвигу химического потенциала электронного газа,

$$\mu'' = \mu - n_0 u(0) + \frac{2m\Phi(0)}{\hbar^2 k_0^2},$$

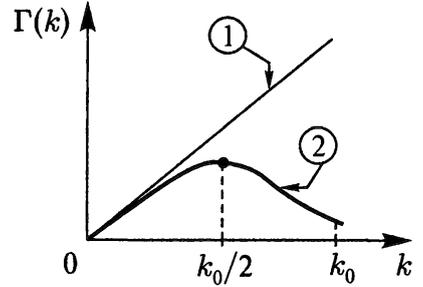


Рис. 75. Зависимость затухания электронных возбуждений $\Gamma(k)$ вследствие их рассеяния на разреженной тяжелой примеси в случаях некоррелированного расположения узлов рассеяния (1) и экспоненциально убывающей их корреляции (2)

то получим, что при $k \ll k_0$ за счет последнего слагаемого происходит обязанная учету взаимодействия электронов с разреженной примесью небольшая модификация эффективной массы электрона:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \mu'',$$

$$m^* = m \frac{\hbar^4 k_0^4}{\hbar^4 k_0^4 + 16m^2 \Phi(0)} \cong m \left(1 - \frac{16m^2 \Phi(0)}{\hbar^4 m^4} \right).$$

§ 4. Оценка удельного сопротивления электронного газа и обсуждение

Полученные в предыдущем параграфе результаты позволяют непосредственно оценить удельное сопротивление электронного газа в кристаллической ионной решетке, связанное с рассеянием его частиц (или соответствующих им блоховских волн) на статической (что позволило нам ограничиться рассмотрением однокомпонентной системы и пренебречь эффектами отдачи на тяжелые частицы при рассеянии на них электронов), случайно расположенной (что позволило простейшим образом произвести усреднение по расположениям рассеивающих электроны центров), разреженной (что позволило ограничиться рассмотрением проблемы только двух тел и использовать только низкоскоростное приближение длины рассеяния для t -матрицы) и немагнитной (учет рассеяния без изменения спинового состояния электрона) примеси. Так как согласно гл. 3, § 6, п. в) удельное сопротивление вырожденного электронного газа пропорционально затуханию $\Gamma(k)$ на границе Ферми (без учета квадратичных по θ/ε_F поправок),

$$\rho = \frac{1}{\sigma_e} = \frac{2m}{e^2 n} \frac{\Gamma(k_F)}{\hbar},$$

а в оговоренном выше приближении

$$\Gamma(k_F) = \frac{n_0^2 u^2(0)}{2\pi \hbar^2} k_F,$$

где $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$, то получающаяся величина

$$\rho = n_0^2 \frac{3\pi m u^2(0)}{2\hbar^2 e^2 \varepsilon_F}$$

соответствует при заданных величинах $n_0 = N_0/V$ и $u(0)$ остаточному сопротивлению металла, которое наблюдается и становится основным при низких температурах, когда рассеяние электронов на тепловых колебаниях кристаллической решетки становится уже несущественным (см. рис. 45), а область сверхпроводящего состояния еще не достигнута.

Расчет температурных поправок, связанных с размытием сферы Ферми, не сложен, но в данной схеме вряд ли целесообразен. Дело не только в том, что вклад в удельное сопротивление за счет рассеяния электронов на возникающих тепловых колебаниях решетки с увеличением температуры достаточно быстро начинает превосходить полученную выше величину остаточного сопротивления. Колебания кристаллической решетки повлекут за собой колебания содержащихся в ней при-

месных центров (они уже не могут считаться неподвижными), что, естественно, увеличит эффективное сечение рассеяния на них электронов системы. Корректное рассмотрение этой проблемы с учетом эффектов отдачи при рассеянии электронов на примесных центрах возможно при рассмотрении с самого начала двухкомпонентной неидеальной системы электроны — подвижная примесь с привлечением методов, аналогичных развитым в предыдущей главе, что уже не укладывается в тематику данного исследования, основанного на квадратичном гамильтониане однокомпонентной системы.

Послесловие

Завершая издание курса «Термодинамика и статическая физика», в частности его четвертого тома «Квантовая статистика», необходимо отметить, что автор не реализовал всего того, что было им первоначально задумано. Читаемый им в течение многих лет спецкурс по квантовой статистике, конечно же, варьировался, появлялись новые сюжеты, а некоторые вполне разработанные разделы отходили на второй план или совсем опускались, погружаясь в не разбираемые годами завалы бумаг. Потери неизбежны при всех жизненных поворотах (не говоря уже о квартирных переездах). Кроме того, с годами меняется и отношение автора к излагаемому материалу: то, что первоначально казалось ему (а также и окружению) чрезвычайно важным и актуальным, со временем переосмысливалось, и интерес к разработке данного вопроса подчас существенно снижался. Следует заметить также, что изложение проблем, требующих подчас остроумных и нестандартных математических приемов, длительных вычислений и выписывания формул, не помещающихся на целой странице, в лекционном курсе воспринимается аудиторией не как достижение научной творческой мысли, а как обычный и неинтересный теоретический мусор.

И все же, если бы не эти потери, то данный том дополнился бы еще по крайней мере двумя сюжетами (не считая изложения диаграммной техники формальной теории возмущений, которое задумывалось как приложение), в свое время включаемыми автором в свой лекционный курс. Одному человеку без соавторов и коллективного обсуждения трудно отразить в учебном варианте все теоретические находки в области квантовой статистики, так что целый ряд проблем статистической теории квантовых систем (кстати сказать, весьма сложных) остался за рамками данного пособия.

Автор отдает себе отчет в том, что в представленном материале имеются недостатки, которые ему самому, наверное, в большей степени заметны, чем читателю, и готов принимать упреки по их поводу.

Являясь выпускником физического факультета МГУ (в то далекое время находившегося в старом здании на Моховой), автор считает своим долгом отметить тех людей (многие из которых ушли из нашей жизни), которым он обязан формированием своего научного мировоззрения и невольное подражание которым способствовало выработке методики общения с аудиторией и приобретению опыта в оценке не только способностей, но и общечеловеческих качеств своих старших и младших коллег по работе и учебе. Ограничусь самым минимумом, так как невозможно, не выходя из жанра краткого послесловия, перечислить всех, о ком сохранилась добрая память.

Сначала о математиках. Придя в 1949 году на физический факультет, автор попал в группу, которую вел Петр Сергеевич Моденов. Он приучал нас, школьников и пришедших после службы в армии, не только осмысленно формулировать математические понятия, правильно писать и располагать материал на доске, грамотно рисовать графики исследуемых решений, но и давал часто дополнительный материал и заражал нас влюбленностью в предмет, прививал общую математическую культуру. Не случайно, что при последующем (уже на 4-м курсе) распределении по специальностям группу теоретиков и математиков составили в основном студенты, обучавшиеся на младших курсах у П. С. Моденова.

Юлий Лазаревич Рабинович читал нам лекции по теории функций комплексного переменного для всего курса, а для математиков и теоретиков — ее дальнейшее развитие, интегральные преобразования, асимптотики и т. п. Более совершенного курса по этому разделу тогда просто не существовало. Автор много лет пользовался записями его лекций — в них было все четко, последовательно и полно. В то время это был блестящий преподаватель-универсал (утверждали, что он мог без специальной подготовки прочесть спецкурс по любому из разделов высшей математики на мехмате или физическом факультете), но он, как и Моденов, принадлежал к традиционной для физического факультета группе «вечных доцентов» — людей высочайшей квалификации, целиком и бескорыстно отдающих свое время и свои силы служению факультету и воспитанию студентов, «пренебрегая презренной пользой» (как говорил наш великий поэт).

Андрей Николаевич Тихонов. Он тогда еще не был полным академиком, и книги «Тихонов и Самарский» еще не существовало. Его журчащая манера чтения и благожелательная интонация создавали атмосферу какого-то своеобразного уюта. Он, как никто, умел подавать подчас сложный для слушателей материал так, что он воспринимался сразу без дополнительного его додумывания. Мы особенно оценили его манеру чтения после того, как на несколько лекций его заменил молодой соавтор готовящегося к изданию учебника по методам математической физики.

Теперь о физиках. Прежде всего автор хотел бы вспомнить о Владимире Дмитриевиче Кривченкове, человеке, который, по существу, поставил систему обучения по квантовой механике на физическом факультете МГУ (он тоже относился к категории не оцененных по достоинству «вечных доцентов» факультета). Именно он заставил автора, тогда еще зеленого аспиранта, вести семинарские занятия по квантовой механике, используя материалы еще не созданного им задачника по этой дисциплине. И это была хорошая школа, заставившая автора изучить все имеющиеся в Ленинской библиотеке иностранные руководства по квантовой механике и научившая его обращению со студенческой аудиторией. Его отношение к автору, слегка ироничное (ну как тут не пошутить над таким необычным именем, как «Иридий»), было исключительно доброжелательным. При общении с ним (непосредственно, а затем, после его ухода с факультета, и по телефону) при обсуждении научных вопросов всегда хотелось дотянуться до уровня его понимания данной темы, но войти в его мир удавалось, может быть, далеко не всегда.

Анатолий Александрович Власов был совершенно уникальной личностью и легендой физического факультета. Его владение студенческой аудиторией было абсолютным. Он появлялся перед ней всегда в форме и всегда напряженным, его блистательная манера чтения завораживала, а несокрушимая вера в собственную аргументацию невольно передавалась и слушателям. Автору данных строк повезло прослушать три прочитанных им курса: на 3-м курсе он читал нам, как тогда считали, свой коронный курс макроскопической электродинамики, на 4-м курсе нам же он решил читать квантовую механику. Это был не курс квантовой механики в обычном понимании, а курс критики ее основ, в каждом положении которых усматривались неустранимые противоречия. Это вызвало активное возражение профессуры кафедры теоретической физики, и Власов, закончив чтение лекций до конца семестра, от дальнейшего чтения курса был отстранен. Третьим курсом лекций, который читал Власов на физическом факультете уже в новом здании на Ленинских горах, был курс статистической физики. Как и в предыдущем случае, игнорируя утвержденную программу курса, он излагал свой оригинальный подход к проблеме многих тел, а если это попутно касалось статистической физики равновесных систем, то его лекция превращалась в сокрушительную критику метода Гиббса (без его последовательного изложения). Автор данных воспоминаний был тогда уже ассистентом

кафедры теоретической физики и ему было поручено вести семинары во всех десяти группах власовского потока. После каждой лекции он в беседах с Власовым выяснял, какой материал, по его мнению, желательно рассматривать на семинарах (предложения, как правило, были редкими и частными). Чтобы как-то смягчить создавшуюся обстановку, заведующий кафедрой Н. Н. Боголюбов предложил давать на семинарах необходимый программный материал, чтобы студенты все же знали, что такое виртуальное разложение, распределение Ферми и уравнение Больцмана. Сложившийся двойной стандарт, естественно, долго просуществовать не мог, и при очередном утверждении лекторов декан снял кандидатуру Власова как не пожелавшего отражать в своих лекциях программный материал.

Конечно, Власов по своей натуре был не только исключительно ярким, но и очень сложным человеком, порой ради выхода своих эмоций сознательно создававшим вокруг себя весьма напряженную обстановку. В нем было как бы два человека. «Публика» его возбуждала, он становился очень активным и резким, он не терпел человеческой тупости и часто срывался на резкость, если ему возражали или не понимали. В беседах же tête-à-tête он был внимателен к собеседнику, мягок, участлив и добр. По своей природе он был ученым-одиночкой. Он не терпел возражений и тем более соперничества. Поэтому многие его ученики как-то быстро и незаметно уходили от него, не перенимая его безапелляционный стиль работы и не становясь на него похожими.

Характерно отношение к Власову академика Н. Н. Боголюбова, заменившего его в 1953 году на посту заведующего кафедрой теоретической физики. Относясь иронически к публичным нападкам на себя со стороны Власова, он всегда высоко ставил его заслуги, сыграв существенную роль в присуждении в 1970 году за работу 1938 года (разрыв более 30 лет!) Ленинской премии и в публикации его последней, во многом спорной, монографии, не прошедшей обязательного в то время положительного рецензирования («на то он и Власов, чтобы иметь право на публикацию своих трудов, не считаясь с мнением рецензентов»).

Об академике Николае Николаевиче Боголюбове, крупнейшем физике-теоретике и математике второй половины XX века, написано много воспоминаний и обзоров его невероятно обширной творческой деятельности. Его руководство кафедрой теоретической физики физического факультета, начавшееся в 1953 году, на фоне его последующей деятельности в Объединенном институте ядерных исследований в Дубне, в Математическом институте им. В. А. Стеклова и сфере самой Академии наук СССР выглядело, может быть, несколько побочным занятием, но, несмотря на свое относительно скромное формальное положение, именно руководимая им кафедра в течение многих лет была основным поставщиком научных кадров в теоретические отделы не только в ОИЯИ и МИАН, но также и в руководимые уже учениками Боголюбова Институт высоких энергий в Протвино и Институт ядерных исследований РАН.

Став заведующим кафедрой теоретической физики физического факультета МГУ еще в старом здании на Моховой, он организовал свой еженедельный научный семинар (параллельно существовавшему в теоретическом отделе МИАН), на который регулярно собирались теоретики не только из МГУ, и превратил его, по существу, в школу современной теоретической физики, основным направлением которой в то время были квантовая теория поля, теория элементарных частиц и квантовая статистика. Высокий научный авторитет боголюбовского семинара привлекал многих теоретиков, уже известных и только начинающих. На нем выступали со своими докладами не только отечественные ведущие ученые, но и известные зарубежные специалисты, такие как Ф. Дайсон, Р. Кубо и др. Если на семинаре, на котором докладывались результаты исследований проблемных вопросов теории, еще не опубликованные в печати, возникало непонимание со стороны аудитории, то Боголюбов,

быстро вникавший в существо вопроса, тут же давал исчерпывающие разъяснения присутствующим, а иногда и предсказывал окончательный результат докладываемой работы, чем приводил в смущение ее автора. Если же то, что писалось на доске, не составляло особого интереса, он снимал очки и, вполуха слушая выступающего и думая о чем-то своем, рисовал на листе бумаги замысловатые фигурки, предоставляя заседанию спокойное течение (отрицательные оценки и разгромные выводы не практиковались, любая, даже слабая работа «представляла интерес»).

Иной характер имели заседания, на которых выступал сам Боголюбов. Получая иностранную научную периодику (которая поступала в его адрес раньше, чем появлялась на полках научных библиотек) и многочисленные препринты еще не опубликованных работ, он сразу же разбирался во всех свежих публикациях и с каким-то радостным удовольствием спешил рассказать о заинтересовавших его проблемах своим сотрудникам, часто значительно развивая и комментируя излагаемый материал (характер этих «информационных» семинаров существенно отличался от принятого в иных теоретических группах, где сотрудники руководителя семинара заранее тщательно согласовывали с ним заготавливаемый ими материал к очередному заседанию).

В случаях, когда Боголюбов рассказывал о результатах своих собственных исследований (это занимало подчас несколько заседаний), этот материал оказывался практически полностью продуманным и разработанным до уровня, необходимого для публикации (вне зависимости от того, привлекал он затем к этой работе своих сотрудников в качестве соавторов, или нет).

Сам стиль семинаров и лекций Боголюбова имел по отношению к его ученикам и последователям огромное воспитательное значение. Вследствие абсолютного авторитета и огромного его воздействия на собеседников как личности возникало невольное ему подражание не только в отношении характера и манеры его суждений и оценок, но и речи, пластики и т. д., вплоть до предпочтения сорта сигарет. Являясь тонким психологом, он быстро разбирался в людях, определяя не только их способности, но и устанавливая по отношению к ним степень своего доверия.

Для отношений Боголюбова со своими сотрудниками и учениками была характерна доверительная простота и никакого «генеральского» величия. С ним свободно можно было обсуждать не только научные, но и личные проблемы. Он не признавал по отношению к ним какого-либо принуждения или какой-либо формы крепостного права, снисходительно относился к их слабостям и промахам, а подчас иронизировал по поводу случившегося наущничанья и жалоб их друг на друга. Обидно, что после его кончины многие из них вместо того, чтобы поддержать его дело на физическом факультете, перестали сотрудничать с его кафедрой, которой он, уже отставленный по возрасту от всех других начальственных должностей, заведовал до последних дней своей жизни.

С исключительной ответственностью относился Н. Н. Боголюбов к качеству своей научной работы и требовал от своих учеников такого же к ней подхода. Бывая у него дома, мы видели, с какой тщательностью он (часто работая на двойных листах типа А2) проводил свои выкладки, внимательно проверяя каждый знак и каждый мелкий индекс, понимая, что малейшая небрежность может свести на нет результаты многочасового труда. Он учил нас в каждом исследовании усматривать и подчеркивать стержневые моменты, четко формулировать исходные положения и постановку задачи, заранее не соблазняться кажущимся успехом и не огорчаться при получении отрицательного результата. Он никогда не употреблял выражений «легко показать, что...» или «хорошо известно, что...», делая свои работы (или доклады) в смысловом понимании полными. При непосредственном общении с ним как бы вскользь сделанное им замечание или поясняющий набросок на бумаге сразу (или после

додумывания дома) проясняли ситуацию, стимулируя застопорившееся исследование к дальнейшему развитию.

Его отдельные замечания и высказывания по разным проблемам складывались в общее понимание всех основных проблем современной теоретической физики. Обладая огромной эрудицией во всех ее разделах, Н. Н. Боголюбов усматривал неожиданные для коллег аналогии, казалось бы, в совершенно различных физических явлениях и математических приемах, что давало ему возможность сразу формулировать рациональную постановку проблемы и реально предугадывать результаты ее рассмотрения.

В созданном усилиями профессора Л. В. Левшина музее физического факультета МГУ академику Н. Н. Боголюбову, как одному из выдающихся деятелей факультета, и его школе отведен специальный стенд; в городе Саров, где до 1953 года работал Боголюбов в комплексе «Арзамас-16», установлена бронзовая доска с его барельефом, в Нижнем Новгороде, родине Н. Н. Боголюбова, ему как дважды Герою Социалистического Труда прижизненно был установлен бронзовый бюст, в городе Дубна Московской области, где Н. Н. Боголюбов с 1956 года был директором Лаборатории теоретической физики, а затем и директором всего Объединенного института ядерных исследований и где раскрылся его талант руководителя огромного и сложного коллектива, в ознаменование его заслуг Лаборатории теоретической физики присвоено имя академика Н. Н. Боголюбова. Международное признание исключительных научных заслуг Н. Н. Боголюбова отмечено многочисленными престижными наградами и почетными званиями.

Упомянув и выразив благодарность своим основным учителям (к сожалению, не всем), автор считает своим долгом в послесловии хотя бы кратко представить тех людей, которые помогали ему в создании данного учебного пособия, и выразить им за это свою искреннюю признательность.

Где-то в 1964 году доцент физического факультета Н. П. Попцов (который имел двойное высшее образование, вел занятия по физике и параллельно читал лекции по философии, а в новом здании факультета стал заведовать лабораторией офсетной печати и который, по-видимому, помнил автора в бытность его студентом), встретив автора в коридоре, предложил ему, как успешно читающему лекции по статистической физике, издать ротاپринтным способом их конспект, чтобы студенты могли использовать его в качестве учебного пособия в библиотеке факультета, что и было осуществлено в 1965–1966 годах в виде двух выпусков.

Последующие выпуски и переиздание первых были реализованы по предложению зам. зав. Отделения ядерной физики физического факультета Г. И. Горяги и были выполнены весьма тщательно (улучшилась техника печати) и в короткие сроки. По отношению к этим людям (уже ушедшим из нашей жизни) автор до сих пор испытывает чувство признательности за доверие, не спровоцированное какими-либо предварительными личными отношениями или рекомендациями.

Значительное содействие делу создания всего курса по термодинамике и статистической физике оказала научная библиотека физического факультета МГУ в лице А. П. Крыловой и М. А. Знаменской. Автор выражает им особую благодарность за постоянную готовность оказать ему информационную помощь, доброту и ценное содействие в непростых ситуациях повседневной факультетской жизни.

Новый этап в деле публикации учебных пособий автора наступил тогда, когда заведующий редакции физической литературы Издательства МГУ С. И. Зеленский (бывший ранее студентом физического факультета и слушавший лекции автора) предложил ему создать полноценное учебное пособие в виде книги и опубликовать ее в Издательстве МГУ. Автор искренне благодарен ему не только за то, что он ввел его

в курс издательского дела, но, главным образом, что он, фактически силой, определив жесткие сроки, заставил автора в течение менее полугода интенсивно поработать и завершить написание пособия по кинетической части курса статистической физики. В результате в 1987 году появилась книга объемом 560 страниц в синем коленкором переплете, посвященная теории неравновесных статистических систем (т. е. вторая часть общего курса статистической физики).

Первая часть курса (равновесная теория) вышла в том же издании в 1991 году и имела объем ровно 800 страниц (уже в красном переплете). Огромный труд по редактированию этой книги (набранной тогда еще ручным способом) взяла на себя Р. А. Бунатян, великолепно осуществив эту трудоемкую работу и преподав ценные уроки автору по оформлению печатного материала, окончательной коррекции клише рисунков и пр. Автор особо благодарен Р. А. Бунатян за дружеское к нему расположение и реальную помощь в окончательной доработке этой части курса.

С изданием этих двух книг были связаны и чисто формальные трудности, так как объем каждой из них значительно превышал запланированный издательством. Обычно в подобных случаях авторам приходилось укорачивать абзацы, вычеркивать строчки и т. п., но здесь пришлось бы вынимать целые главы, издание такого урезанного варианта потеряло бы смысл и его пришлось бы отложить, как говорится, до лучших времен. Сложившуюся ситуацию разрешил академик Анатолий Алексеевич Логунов, бывший в это время ректором МГУ, которому было подчинено и Издательство МГУ: на ходатайстве об увеличении объема издания (учебные пособия в этом издательстве были безгонорарными, и это увеличение никаких «доходов» автору не сулило) он наложил резолюцию, обязывающую издать учебное пособие Квасникова в представленном им в издательство виде. Автор глубоко ценит проявленное к нему доверие и всегда с особой благодарностью вспоминает об оказанной ему со стороны Анатолия Алексеевича существенной и своевременной помощи, в результате которой издание этих книг состоялось (в 1992 году автор был удостоен Ломоносовской премии МГУ «За создание уникального курса лекций и учебного пособия по статистической физике и термодинамике»).

Наконец, автор считает своим долгом с особой благодарностью отметить роль издательства УРСС в реализации настоящего издания полного курса «Термодинамика и статистическая физика». Руководитель издательства Доминго Марин Рикой как выпускник физического факультета, знакомый с автором еще по своим студенческим годам, являлся инициатором переиздания упомянутых выше книг 1987 и 1991 годов в значительно улучшенном и дополненном их варианте и в виде трех томов, более удобных в их использовании. Являясь тонким психологом, Доминго Марин Рикой, преодолевая пассивность автора, сумел убедить его в целесообразности издания читаемого им много лет на физическом факультете МГУ курса лекций по квантовой статистике в виде пособия, завершающего в известном смысле весь цикл учебного курса по статистической физике. Располагая современными техническими средствами и грамотными сотрудниками, издательство УРСС, пойдя навстречу автору и принимая у него рукописный материал, выполнило все издательские работы на высоком профессиональном уровне, учтя все замечания и исправления, сделанные автором в корректуре. Автор приносит искреннюю благодарность за доброжелательное и терпеливое к нему отношение, проявленное коллективом издательства и лично его руководителем Доминго Марин Рикой.

Автор выражает глубокую благодарность академику РАН В. А. Рубакову, а также чл.-корр. РАН В. Б. Брагинскому и проф. Ф. Я. Халили за положительное отношение к представленному им материалу и за ценные замечания и советы, которые автор постарается учесть в своей дальнейшей работе.

Уважаемые читатели! Уважаемые авторы!

Наше издательство специализируется на выпуске научной и учебной литературы, в том числе монографий, журналов, трудов ученых Российской академии наук, научно-исследовательских институтов и учебных заведений. Мы предлагаем авторам свои услуги на выгодных экономических условиях. При этом мы берем на себя всю работу по подготовке издания — от набора, редактирования и верстки до тиражирования и распространения.



URSS

Среди вышедших и готовящихся к изданию книг мы предлагаем Вам следующие:

Квасников И. А. Термодинамика и статистическая физика.

Т. 1: Теория равновесных систем: Термодинамика.

Т. 2: Теория равновесных систем: Статистическая физика.

Т. 3: Теория неравновесных систем.

Квасников И. А. Молекулярная физика.

Бриллюэн Л. Квантовая статистика.

Базаров И. П. Заблуждения и ошибки в термодинамике.

Хайтун С. Д. История парадокса Гиббса.

Агеев Е. П. Неравновесная термодинамика в вопросах и ответах.

Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов.

Мюнстер А. Химическая термодинамика.

Крылов Н. С. Работы по обоснованию статистической физики.

Зайцев Р. О. Введение в современную статистическую физику.

Варикаш В. М., Болсун А. И., Аксенов В. В. Сборник задач по статистической физике.

Баранов А. А., Колпащиков В. Л. Релятивистская термомеханика сплошных сред.

Шапкин А. И., Сидоров Ю. И. Термодинамические модели в космохимии и планетологии.

Окунь Л. Б. Физика элементарных частиц.

Окунь Л. Б. Лептоны и кварки.

Борн М. Лекции по атомной механике.

Воронов В. К., Подоплелов А. В. Современная физика.

Иванов Б. Н. Законы физики.

Капитонов И. М. Введение в физику ядра и частиц.

Ляпунов А. М. Работы по теории потенциала.

Угаров В. А. Специальная теория относительности.

Вейль Г. Пространство. Время. Материя. Лекции по общей теории относительности.

Кириллов В. М. и др. Решение задач по физике.

Колоколов И. В. и др. Задачи по математическим методам физики.

Жукарев А. С. и др. Задачи повышенной сложности в курсе общей физики.

Розенблат Г. М. Механика в задачах и решениях.

Матвиенко Ю. Г., Сапунов В. Т. Сопротивление материалов в задачах и решениях.

Шепелев А. В. Оптика. Готовимся к экзаменам, зачетам, коллоквиумам.

Сурдин В. Г. Астрономические задачи с решениями.

Николаев О. С. Физика и астрономия: Курс практических работ для средней школы.

Гликлик Ю. Е. Глобальный и стохастический анализ в задачах математической физики.

Кронин Дж., Гринберг Д., Телегди В. Теоретическая физика. Сборник задач с решениями.

Планк М. Введение в теоретическую физику. Кн. 1–5: Общая механика; Механика деформируемых тел; Теория электричества и магнетизма; Оптика; Теория теплоты.

Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике.

Вайнберг С. Мечты об окончательной теории. Пер. с англ.

По всем вопросам Вы можете обратиться к нам:
тел./факс (095) 135–42–16, 135–42–46
или электронной почтой URSS@URSS.ru
Полный каталог изданий представлен
в Интернет-магазине: <http://URSS.ru>

Научная и учебная
литература

Представляем Вам наши лучшие книги:



Теория поля

Рубаков В. А. Классические калибровочные поля. Бозонные теории.

Рубаков В. А. Классические калибровочные поля. Теории с фермионами. Некоммутативные теории.

Коноплева Н. П., Попов В. Н. Калибровочные поля.

Иваненко Д. Д., Сарданашвили Г. А. Гравитация.

Сарданашвили Г. А. Современные методы теории поля. Т. 1–4.

Волобуев И. П., Кубышин Ю. А. Дифференциальная геометрия и алгебры Ли и их приложения в теории поля.

Маслов В. П., Шведов О. Ю. Метод комплексного роста в задаче многих частиц и квантовой теории поля.

Розенталь И. Л., Архангельская И. В. Геометрия, динамика, Вселенная.

Богуш А. А. Введение в калибровочную полевую теорию электрослабых взаимодействий.

Богуш А. А., Мороз Л. Г. Введение в теорию классических полей.

Оптика. Колебания и волны

Саржевский А. М. Оптика. Полный курс.

Майкельсон А. А. Исследование по оптике.

Федоров Ф. И. Оптика анизотропных сред.

Стрэтт (Рэлей) Дж. В. Волновая теория света.

Иванов Б. Н. Мир физической гидродинамики. От проблем турбулентности до физики космоса.

Добролюбов А. И. Бегущие волны деформации.

Добролюбов А. И. Скольжение, качение, волна.

Добролюбов А. И. Волновой перенос вещества.

Кравченко И. Т. Теория волновых процессов.

Шашков А. Г., Бубнов В. А., Янковский С. Ю. Волновые явления теплопроводности.

Гончаренко А. М., Карпенко В. А. Основы теории оптических волноводов.

Гончаренко А. М. Гауссовы пучки света.

Бардзокас Д. И. и др. Распространение волн в электромагнитоупругих средах.

Кабисов К. С., Камалов Т. Ф., Лурье В. А. Колебания и волновые процессы.

Теория групп и ее применения

Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам.

Вейль Г. Классические группы. Их инварианты и представления.

Вейль Г. Симметрия.

Вигнер Э. Инвариантность и законы сохранения. Этюды о симметрии.

Ляховский В. Д., Болохов А. А. Группы симметрии и элементарные частицы.

Менский М. Б. Группа путей: измерения, поля, частицы.

Менский М. Б. Метод индуцированных представлений: пространство-время и концепция частиц.

Эйзенхарт Л. П. Непрерывные группы преобразований.

Федоров Ф. И. Группа Лоренца.

Квантовая механика

Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике.

Ван дер Верден Б. Л. Метод теории групп в квантовой механике.

Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике. Ч. 1, 2.

Горбачевич А. К. Квантовая механика в общей теории относительности.

Килин С. Я. Квантовая оптика: поля и их детектирование.

Вильф Ф. Ж. Логическая структура квантовой механики.

Эддингтон А. Относительность и кванты.

Бройль Л. де. Введение в волновую механику.

Представляем Вам наши лучшие книги:



URSS



Брайан Грин

ЭЛЕГАНТНАЯ ВСЕЛЕННАЯ

Суперструны, скрытые размерности
и поиски окончательной теории

Перевод с английского

Книга Брайана Грина «Элегантная Вселенная» — увлекательнейшее путешествие по современной физике, которая как никогда ранее близка к пониманию того, как устроена Вселенная. Квантовый мир и теория относительности Эйнштейна, гипотеза Калуцы—Клейна и дополнительные измерения, теория суперструн и браны, Большой взрыв и мульти-вселенные — вот далеко не полный перечень обсуждаемых вопросов.

Используя ясные аналогии, автор переводит сложные идеи современной физики и математики на образы, понятные всем и каждому. Брайан Грин срывает завесу таинства с теории струн, чтобы представить миру 11-мерную Вселенную, в которой ткань пространства рвется и восстанавливается, а вся материя порождена вибрациями микроскопических струн.

Роджер Пенроуз

НОВЫЙ УМ КОРОЛЯ

О компьютерах, мышлении и законах физики

Перевод с английского

Монография известного физика и математика Роджера Пенроуза посвящена изучению проблемы искусственного интеллекта на основе всестороннего анализа достижений современных наук. Возможно ли моделирование разума? Чтобы найти ответ на этот вопрос, Пенроуз обсуждает широчайший круг явлений: алгоритмизацию математического мышления, машины Тьюринга, теорию сложности, теорему Геделя, телепортацию материи, парадоксы квантовой физики, энтропию, рождение вселенной, черные дыры, строение мозга и многое другое.



Серия «Синергетика: от прошлого к будущему»

Трубецков Д. И. Введение в синергетику. В 2 кн.: Колебания и волны; Хаос и структуры.

Арнольд В. И. Теория катастроф.

Малинецкий Г. Г. Математические основы синергетики.

Малинецкий Г. Г., Потапов А. Б. Современные проблемы нелинейной динамики.

Хакен Г. Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным системам.

Баранцев Р. Г. Синергетика в современном естествознании.

Андреанов И. В., Баранцев Р. Г., Маневич Л. И. Асимптотическая математика и синергетика.

Пригожин И. Неравновесная статистическая механика.

Пригожин И., Николис Г. Познание сложного. Введение.

Пригожин И., Глендсдорф П. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций.

Тел./факс:

**(095) 135-42-46,
(095) 135-42-16,**

E-mail:

URSS@URSS.ru

http://URSS.ru

Наши книги можно приобрести в магазинах:

«Библио-Глобус» (м. Лубянка, ул. Мясницкая, 6. Тел. (095) 925-2457)

«Московский дом книги» (м. Арбатская, ул. Новый Арбат, 8. Тел. (095) 203-8242)

«Москва» (м. Охотный ряд, ул. Тверская, 8. Тел. (095) 229-7355)

«Молодая гвардия» (м. Полянка, ул. Б. Полянка, 28. Тел. (095) 238-5083, 238-1144)

«Дом деловой книги» (м. Пролетарская, ул. Марсиская, 9. Тел. (095) 270-5421)

«Гнозис» (м. Университет, 1 гум. корпус МГУ, комн. 141. Тел. (095) 939-4713)

«У Кентавра» (РГТУ) (м. Новослободская, ул. Чайнова, 15. Тел. (095) 973-4301)

«СПб. дом книги» (Невский пр., 28. Тел. (812) 311-3954)

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
КЛАССИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТСКИЙ УЧЕБНИК



Иридий Александрович
КВАСНИКОВ

Авторитетный специалист в области статистической физики, опытный преподаватель и методист.

С 1962 года является ведущим лектором и преподавателем по курсу «Термодинамика и статистическая физика» для студентов 4-го года обучения на физическом факультете МГУ им. М. В. Ломоносова и по курсу квантовой статистики для студентов-теоретиков 5-го года обучения.

В 1992 году автор был удостоен Ломоносовской премии «За создание уникального курса и учебного пособия по статистической физике и термодинамике», которое стало первым учебным пособием, удостоенным этой премии; а также удостоен звания «Заслуженный преподаватель МГУ».

Предлагаемый вниманию читателей четвертый и завершающий том учебного пособия «Термодинамика и статистическая физика» написан на основе читаемого И. А. Квасниковым в течение многих лет двухсеместрового специального курса «Квантовая статистика» для студентов теоретической специализации физического факультета МГУ и закрывает тот пробел в учебной литературе, который существовал в отношении статистической теории неидеальных квантовых систем многих тел. В книге изложены основные постановочные вопросы этого раздела статистической физики, метод двухвременных температурных функций Грина и их связь с физическими характеристиками статистических систем, с линеаризованными кинетическими уравнениями, с электромагнитными свойствами систем, с проблемами рассеяния редких пучков частиц на статистических системах и др. Из прикладных вопросов следует отметить достаточно подробное изложение теории слабо-неидеального бозе-газа, теории сверхпроводимости и проблем физически оправдываемых процедур расцепления цепочек уравнений для функций Грина.



E-mail: URSS@URSS.ru
Каталог изданий
в Internet:
<http://URSS.ru>

НАУЧНАЯ **URSS**
И УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА

Тел./факс:
7 (095) 135-42-16
7 (095) 135-42-46

