

Глава 20

Микроскопическая теория e - e
взаимодействия.

Часть 3

Оглавление

20 Микроскопическая теория e-e взаимодействия.	
Часть 3	1
20.0.1 Модель желе	3
20.0.2 Формулировка теории Хартри-Фока в технике вторичного квантования	10
20.0.3 Пространство Фока и представление чисел заполнения (occupation number). Базисный вектор состояния	10
20.0.4 Представление наблюдаемых величин . .	17
20.0.5 Полевые операторы	18
20.0.6 Распространение подхода вторичного квантования на наблюдаемые физ. величины	19
20.0.7 Конструирование Гамильтониана в терминах вторичного квантования	24
20.0.8 Построение Гамильтониана в терминах вторичного квантования	27
20.1 Приближение Хартри-Фока	28
20.1.1 Энергия основного состояния	28

20.0.1 Модель желе

Ввиду ее особой важности, рассмотрим данный под-

ход более последовательно и дадим ему обоснование.

В лекциях по теории Ферми жидкости мы уже обсуждали, что электронная жидкость описывается фундаментальным гамильтонианом \hat{H} , представляющим N электронов, которые взаимодействуют друг с другом и с однородным фоном положительного заряда:

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|} + \hat{H}_{e-b} + \hat{H}_{b-b} \quad (20.1)$$

Здесь \hat{r}_i и \hat{p}_i — квантово-механические операторы координаты и импульса i -го электрона, m — масса электрона, e — величина заряда электрона. Шапки обозначают операторы. Предполагается, что электроны заключены в d -мерный кубический ящик объемом L^d . В термодинамическом пределе как N , так и L стремятся к бесконечности таким образом, что средняя электронная плотность $n \equiv N/L^d$ остается постоянной.

Последние два слагаемых в \hat{H} представляют собой электрон-фононное и фонон-фононное взаимодействия и определяются:

$$\hat{H}_{e-b} = -e^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{n}(\mathbf{r})n_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (20.2)$$

и

$$\hat{H}_{b-b} = \frac{e^2}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{n_b(\mathbf{r})n_b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (20.3)$$

где

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i) \quad (20.4)$$

есть оператор электронной плотности и

$$en_b(\mathbf{r}) = en \quad (20.5)$$

есть однородная плотность зарядового фона. В (20.5) мы заменили реальную структуру фона, на котором электроны блуждают (например, по атомной решетке) на однородный желеобразный континуум положительных зарядов: отсюда и название “модель желе”. Основная идея — избавиться от усложнений связанных со структурой материала, уделяя особое внимание отличительным эффектам $e - e$ взаимодействия. Это упрощение вполне реально в полупроводниковых системах, хотя мало реально в кристаллических материалах.

Несмотря на кажущуюся простоту, модель желе представляет собой нерешенную, сложную проблему. В этом разделе рассматриваются некоторые результаты, которые были установлены до сих пор, не вдаваясь в ряд проблем, которые вызывает модель желе.

Регуляризация кулоновского взаимодействия

В модели желе интегралы в уравнениях (20.3) и (20.2) расходятся в термодинамическом пределе $L \rightarrow \infty$. Эту трудность можно разрешить, показав, что бесконечности в уравнениях (20.3) и (20.2) сокращаются эквивалентными бесконечностями противоположного знака в электрон-электронной части гамильтониана. Эта отмена не произошла бы без внешнего фона, который необходим для существования термодинамического предела.

Чтобы явно показать сокращение бесконечностей в \hat{H} , мы в предыдущих лекциях прибегали к математической процедуре, известной как регуляризация кулоновского взаимодействия. Дадим ей более строгое обоснование. Идея состоит в том, чтобы заменить кулоновское взаимодействие другим, обрезав радиус действия до конечного, и изучать систему в пре-

деле в котором этот диапазон намного больше, чем любая другая физическая шкала длины, кроме L . Удобный выбор - это взаимодействие Юкавы

$$v(r, \kappa) = e^2 \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (20.6)$$

Физический гамильтониан восстанавливается, если $\kappa \rightarrow 0$ после перехода к термодинамическому пределу $L \rightarrow \text{infy}$. Процедура оправдана, поскольку физические величины, полученные в результате пределов в этом порядке, конечны и независимы от κ .

Начнем с того, что перепишем потенциал взаимодействия в виде

$$v(r, \kappa) = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{q}} v_q(\kappa) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (20.7)$$

где

$$v_q(\kappa) \equiv \int v(r, \kappa) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (20.8)$$

есть компонента фурье-преобразование потенциала взаимодействия.

Напомним, что преобразование сумм в интегралы проводится как

$$\frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{q}} \dots \rightarrow \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \dots \quad (L \rightarrow \infty)$$

поскольку все вектора q кратны $2\pi/L$.

Теперь член в (20.1) можно переписать как

$$\hat{H}_{e-e} \equiv \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|} = \frac{1}{2L^d} \sum_{\mathbf{q}} v_q(\kappa) [\hat{n}_{-\mathbf{q}} \hat{n}_{\mathbf{q}} - \hat{N}], \quad (20.9)$$

где $\hat{n}_{\mathbf{q}}$ - это компонента фурье-преобразования оператора плотности электронов

$$\hat{n}_{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}. \quad (20.10)$$

Здесь $\hat{n}_{\mathbf{q}=0} = \hat{N}$ - это просто оператор числа частиц. Как и ранее, вычитание члена с \hat{N} нужно для исключения взаимодействия электрона с самим собой (т.е., то же самое, что исключение $i = j$ при суммировании в (20.1)).

Аналогично можно расписать \hat{H}_{e-b} и \hat{H}_{b-b} в терминах \hat{N} . Но наше дело - e-e -взаимодействие. Мы отметим, что $\mathbf{q} = 0$ - компонента в e-e взаимодействии

$$(\hat{H}_{e-e})_{\mathbf{q}=0} = \frac{v_{\mathbf{q}=0}(\kappa)}{2L^d} (\hat{N}^2 - \hat{N}) \quad (20.11)$$

Если же сложить все три члена в термодинамическом пределе $\hat{N} = nL^d$, то окажется, что

$$\frac{(\hat{H}_{e-b})_{\mathbf{q}=0} + (\hat{H}_{b-b})_{\mathbf{q}=0} + (\hat{H}_{e-e})_{\mathbf{q}=0}}{L^d} = -\frac{nv_{\mathbf{q}=0}(\kappa)}{2L^d} \quad (20.12)$$

эта сумма стремится к нулю при $L \rightarrow \infty$ для $\kappa > 0$. Т.о., в термодинамическом пределе все члены, которые зависят от $v_{\mathbf{q}=0}(\kappa)$ сокращаются друг с другом. Именно поэтому можно брать предел $\kappa \rightarrow 0$, который уже не является сингулярным, поскольку q никогда не равно нулю.

Итак, мы действуем в рамках модели желе с регуляризованным гамильтонианом и повторим его.

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2L^d} \sum_{q \neq 0} v_q [\hat{n}_{-\mathbf{q}} \hat{n}_{\mathbf{q}} - \hat{N}], \quad (20.13)$$

где

$$v_q = \lim_{k \rightarrow 0} v_q(k) \quad (20.14)$$

есть операторное выражение фурье-преобразования кулоновского взаимодействия. Процедура регуляризации позволяет отбросить в конце компоненту взаимодействия с $\mathbf{q} = 0$, а также не заботиться о фоне и взаимодействием с фоном.

Заметим, что до сих пор мы не использовали явный вид (20.6) взаимодействие. Оказывается, преобразование Фурье уравнения (20.6) на самом деле является одним из наиболее эффективных способов расчета v_q . Можно показать, что

$$v_q(\kappa) = \begin{cases} \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa^2}, & D = 3, \\ \frac{2\pi e^2}{\sqrt{q^2 + \kappa^2}}, & D = 2 \end{cases} \quad (20.15)$$

Одномерный случай более сложен, так как также требуется отсечка на коротких расстояниях, чтобы избежать неинтегрируемой расходимости взаимодействия при $r = 0$. Это можно сделать с помощью моделирование одномерной системы как бесконечно длинного трехмерного цилиндра столь малого радиуса a , что поперечное движение электронов эффективно “заморожено” в наинизшем энергетическом состоянии и описывается гауссовой волновой функцией. Полученное выражение для преобразования Фурье уравнения (20.6) есть

$$v_q(\kappa, a) = -e^2 e^{(q^2 + \kappa^2)a^2} \text{Ei}[-(q^2 + \kappa^2)a^2] \quad (D = 1), \quad (20.16)$$

где $\text{Ei}(x)$ - экспоненциально-интегральная функция Эйри (см. Градштейн и Рыжик 8.21). Окончательно имеем в пределе $\kappa \rightarrow 0$

$$v_q(\kappa) = \begin{cases} \frac{4\pi e^2}{q^2}, & D = 3, \\ \frac{2\pi e^2}{q}, & D = 2 \end{cases} \quad (20.17)$$

а для 1D системы $v_q(a) \approx -2e^2 \ln qa$ для $qa \ll 1$ или $v_q(a) \approx -\frac{e^2}{q^2 a^2}$ для $qa \gg 1$.

Электронная плотность как физический параметр

Мы уже вводили безразмерный параметр плотности $\bar{n} = na_B^d$ где $d = 2$ или 3 . В таком виде из в модели желе остается только один параметр, включающий массу, заряд и плотность. Боровский радиус не зависит от размерности

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (20.18)$$

Тогда $r_s a_B$ - типичное расстояние между двумя электронами. Можно навести еще большую определенность и определить радиус d - размерной сферы, которая содержит единственный электрон

$$r_s a_B = \begin{cases} \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}, & D = 3, \\ \left(\frac{1}{\pi n}\right)^{1/2}, & D = 2 \\ \left(\frac{1}{2n}\right), & D = 2 \end{cases} \quad (20.19)$$

Прежде чем закрыть этот раздел, отметим, что во многих реальных системах материал, служащий фоном для электронной жидкости (положка) задает значения “эффективной зонной массы” m_b и “эффективного кулоновского взаимодействия” $e^2/\epsilon_b r$ для использования в гамильтониане модели желе. Например, в GaAs эффективная масса электронов вблизи дна зоны проводимости составляет $m_b = 0.067m_e$. В то же время это материал имеет статическую диэлектрическую проницаемость $\epsilon_b \approx 12$, что снижает силу кулоновского взаимодействия, как если бы электрон имел уменьшенный заряд. Эти эффекты индивидуального материального фона можно учесть, переопределив r_s в терминах эффективного боровского радиуса

$$a_B = \frac{\hbar^2 \epsilon_b}{m_b e^2}, \quad (20.20)$$

что гораздо больше стандартного радиуса Бора 0.529\AA . Шкала энергий также перемасштабируется: вместо ридберга возникает эффективный ридберг $Ry^* = e^2/(2\epsilon_b a_B^*)$, который обычно много меньше чем стандартное значение в вакууме.

20.0.2 Формулировка теории Хартри-Фока в технике вторичного квантования

Определения:

Эрмитово-сопряжённая матрица (сопряжённо-транспонированная матрица) — матрица A^* с комплексными элементами, полученная из исходной матрицы A транспонированием и заменой каждого элемента комплексно-сопряжённым ему. Если исходная матрица A имеет размер $m \times n$, то эрмитово-сопряжённая к A матрица A^* будет иметь размер $n \times m$, а её (i, j) элемент будет равен:

$$(A^*)_{ij} = \overline{A_{ji}},$$

где \bar{z} обозначает комплексно-сопряжённое число к z .

20.0.3 Пространство Фока и представление чисел заполнения (occupation number). Базисный вектор состояния

Вторичное квантование возможно благодаря тому факту, что идентичные частицы неразличимы. Большое преимущество этого представления состоит в том, что оно исключает любую привязку к отдельным электронам. Пусть $|\phi_\alpha\rangle$ есть полный ортонормированный набор состояний отдельных частиц, где α - сокращенное обозначение всего набора квантовых чисел (например, импульса, спина, индекса зоны и т.д.), необходимых для определения каждого состояния. Волновые функции

этих состояний обозначим через $\phi_\alpha(\mathbf{r}, \sigma)$, где \mathbf{r} и σ - положение и спин частицы. Неразличимость подразумевает, что можно указать состояние системы из N частиц, просто сказав, сколько частиц находится в каждом из одночастичных состояний, без указания, “кто” эти частицы. Поэтому обозначим

$$|n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle \quad (20.21)$$

состояние системы из N частиц, в которой определено имеется n_1 частиц в состоянии $|\phi_1\rangle$, n_2 частиц в состоянии $|\phi_2\rangle$ и так далее. Эти положительные целые числа n_α называются числами заполнения, и их знание однозначно определяет состояние системы. Состояния в такой форме называют *фоковскими состояниями*. Сумма всех чисел заполнения, конечно должна давать полное число частиц в системе.

Далее, учтем тип статистики частиц (тип симметрии их волновых функций). Система из N идентичных бозонов обладает тем свойством, что ее волновая функция должна быть симметричной относительно перестановки любых двух частиц. Поскольку состояние $\phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \sigma_1)\phi_\alpha(\mathbf{r}_2, \sigma_2)\dots\phi_\alpha(\mathbf{r}_N, \sigma_N)$ удовлетворяет этому свойству для любого N , мы видим, что в бозонной системе число заполнения одночастичного состояния может быть сколь угодно большим.

В отличие от бозонов, система из N идентичных фермионов обладает тем свойством, что ее волновая функция должна быть антисимметричной по отношению к перестановке любых двух частиц. Поскольку состояние $\phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \sigma_1)\phi_\alpha(\mathbf{r}_2, \sigma_2)$ не отвечает антисимметрии, то чтобы выполнить это требование нужно постараться, чтобы в каждом состоянии отдельной частицы не было более одного электрона. Числа заполнения состояний в фермионной системе могут принимать только значения 0 и

1. Это важнейшее свойство известно как принцип исключения Паули.

Таким образом, состояния Фока N -фермионной системы описываются набором из N занятых состояний $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ таким, что $n_\alpha = 1$, когда α принадлежит множеству, и $n_\alpha = 0$ в противном случае. Мы будем использовать символ

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$$

для обозначения таких состояний. В обычном представлении Шредингера эти состояния обозначаются антисимметризованным произведением одночастичных волновых функций, которое мы ранее неоднократно писали.

Его можно записать более компактно как детерминант матрицы $N \times N$ элементов $\phi_{\alpha_i}(\mathbf{r}_j, \sigma_j)$, где $1 \leq i, j \leq N$:

$$\psi_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N}(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2; \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N) = \frac{1}{N!} \det[\phi_{\alpha_i}(\mathbf{r}_j, \sigma_j)] \quad (20.22)$$

Возьмем полный набор одночастичных состояний, например плоских волн. Состояние системы из многих частиц можно характеризовать просто указывая число частиц, находящихся в состоянии \mathbf{p} .

$$|n_1, \dots, n_{\mathbf{p}}, \dots\rangle$$

n_p - число частиц в состоянии \mathbf{p} . Волновая функция системы теперь есть просто произведение плоских волн, по одной на каждую частицу.

Оператор рождения $a_{\mathbf{p}}^+$ вообще (в алгебре Ли) определяется так

$$a_{\mathbf{p}}^+ |\dots, n_{\mathbf{p}}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{p}} + 1} |\dots, n_{\mathbf{p}} + 1, \dots\rangle. \quad (20.23)$$

Как правило, я не буду надевать шляпки на голову операторов $a_{\mathbf{p}}$ и $a_{\mathbf{p}}^+$, когда и так ясно, что это операторы. Начнем с газа

бозонов и рассмотрим состояние

$$a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}'}^+ | \rangle$$

В этом случае рождаются две частицы: вначале с импульсом \mathbf{p}' , затем с импульсом \mathbf{p} . Такой же результат получается, если переставить порядок операторов, поскольку полная волновая функция инвариантна по отношению к перестановке двух частиц. Следовательно, имеем

$$[a_{\mathbf{p}}^+, a_{\mathbf{p}'}^+] = 0 \quad (20.24)$$

Теперь рассмотрим оператор уничтожения

$$a_{\mathbf{p}} | \dots, n_{\mathbf{p}}, \dots \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{p}}} | \dots, n_{\mathbf{p}} - 1, \dots \rangle. \quad (20.25)$$

Точно также получается

$$[a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}] = 0, \quad [a_{\mathbf{p}}, a_{\mathbf{p}'}^+] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}. \quad (20.26)$$

Оператор

$$\hat{N}_{\mathbf{p}} = a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \quad (20.27)$$

характеризует полное число частиц в состоянии \mathbf{p} , так как

$$\hat{N}_{\mathbf{p}} | \dots, n_{\mathbf{p}}, \dots \rangle = n_{\mathbf{p}} | \dots, n_{\mathbf{p}}, \dots \rangle \quad (20.28)$$

Это следует просто из определений (20.23) и (20.25).

Оператор рождения и уничтожения для фермионов

$$c_{\mathbf{p}} | \dots, n_{\mathbf{p}}, \dots \rangle = \delta_{n_{\mathbf{p}},1} (-1)^{\sum_{j<p} n_j} n_{\mathbf{p}} | \dots, n_{\mathbf{p}} - 1, \dots \rangle; \quad (20.29)$$

$$c_{\mathbf{p}}^+ | \dots, n_{\mathbf{p}}, \dots \rangle = \delta_{n_{\mathbf{p}},0} (-1)^{\sum_{j<p} n_j} [1 - n_{\mathbf{p}}] | \dots, n_{\mathbf{p}} + 1, \dots \rangle. \quad (20.30)$$

Здесь множитель

$$(-1)^{\sum_{j < k} n_j} = (-1)^{[n_1 + n + n + \dots + n_{k-1}]}$$

нужен для указания знака многочастичной волновой функции. $\delta_{n_p, 0}$ и $\delta_{n_p, 1}$ введены для того, чтобы не рождалось более 1 частицы в состоянии n_p , или чтобы не уничтожать пустое состояние $n_p = 0$.

Можно то же самое требование записать еще проще

$$c_{\mathbf{p}} |\dots, n_{\mathbf{p}}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{p}}} (-1)^{\sum_{j < p} n_j} n_{\mathbf{p}} |\dots, n_{\mathbf{p}} - 1, \dots\rangle; \quad (20.31)$$

$$c_{\mathbf{p}}^+ |\dots, n_{\mathbf{p}}, \dots\rangle = \sqrt{1 - n_{\mathbf{p}}} (-1)^{\sum_{j < p} n_j} [1 - n_{\mathbf{p}}] |\dots, n_{\mathbf{p}} + 1, \dots\rangle. \quad (20.32)$$

Коммутаторы и антикоммутаторы. Напомню:

Некоммутирующими величины A и B называются величины, коммутатор которых

$$[A, B] = AB - BA \neq 0$$

Антикоммутатор

$$[x, y]_+ = xy + yx$$

Для фермионов, из требования антисимметрии по перестановкам любых двух частиц возникают антикоммутационные соотношения

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{p}}^+, c_{\mathbf{p}'}^+]_+ &= [c_{\mathbf{p}}, c_{\mathbf{p}'}] = 0 \\ [c_{\mathbf{p}}^+, c_{\mathbf{p}'}]_+ &= c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}'} + c_{\mathbf{p}'} c_{\mathbf{p}}^+ = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \\ [c_{\mathbf{p}}, c_{\mathbf{p}'}]_+ &= 0. \end{aligned} \quad (20.33)$$

Из (20.33) следует: $c_{\mathbf{p}}^2 = (c^+)^2 = 0$, т.е. в каждом состоянии может находиться только одна частица.

Точно также как и для бозонов (20.27) и (20.28), для фермионов оператор чисел заполнения:

$$c_i^+ c_i = \hat{n}_i \quad (20.34)$$

Однако, для фермионов это не следует из определения, а нужно вывести. **Задача:** вывести (20.34).

Аналогично (20.34) имеем

$$c_i c_i^+ = 1 - \hat{n}_i \quad (20.35)$$

Складывая (20.34) и (20.35) получаем

$$c_i^+ c_i + c_i c_i^+ = 1. \quad (20.36)$$

Но с другой стороны, если $i \neq j$

$$c_i^+ c_j = -c_j c_i^+ \quad (i \neq j) \quad (20.37)$$

Оператор $\hat{N} = \sum_i c_i^+ c_i$ — оператор полного числа частиц.

Теперь вспомним про спин. Каждое состояние имеет два квантовых числа (\mathbf{p}, σ) . Операторы рождения и уничтожения теперь $\boxed{c_{\mathbf{p}\sigma}^+}$ и $c_{\mathbf{p}\sigma}$. Они удовлетворяют антикоммутиационным соотношениям типа (20.33)

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{p}\sigma}, c_{\mathbf{p}'\sigma'}]_+ &= [c_{\mathbf{p}\sigma}^+, c_{\mathbf{p}'\sigma'}^+]_+ = 0, \\ [c_{\mathbf{p}\sigma}^+, c_{\mathbf{p}'\sigma'}]_+ &= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad (20.38)$$

Нормированная волновая функция, соответствующая плоской волне с импульсом \mathbf{p}

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}},$$

а амплитуда вероятности уничтожения фермиона в точке \mathbf{r} есть

$$\frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{p}}$$

Таким образом, получаем оператор уничтожения в точке \mathbf{r} :

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \\ c_{\mathbf{p}} &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int d^3\mathbf{r} \psi(r) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (20.39)$$

(поскольку у греческих букв в моем наборе символов нет жирного шрифта, то пришлось поставить шляпку, чтобы отличать оператор от волновой функции).

Оператор $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ описывает уничтожение в точке \mathbf{r} частицы с любым импульсом. Аналогично определяется и оператор рождения частицы в точке \mathbf{r} :

$$\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}}^+ e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$$

Коммутационные соотношения выводятся из (20.33) для фермионов:

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')]_+ &= [\hat{\psi}_{\sigma}^+(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')]_+ = 0 \\ [\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')]_+ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} \end{aligned} \quad (20.40)$$

Не путать операторы $\hat{\psi}^+$, $\hat{\psi}$ с векторами состояния $|\varphi(\mathbf{r})\rangle$.

Продолжаем рассматривать ферми-газ. Подобно тому, как оператор $\hat{N}_{\mathbf{p}} = c_{\mathbf{p}}^+ c_{\mathbf{p}}$ представляет число частиц в состоянии \mathbf{p} , оператор $\hat{\rho}(\mathbf{r}, \sigma)$ представляет плотность частиц в точке \mathbf{r} .

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, \sigma) = \hat{\psi}_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (20.41)$$

Тогда полное число частиц в системе равно

$$N = \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{p,\sigma} c_{p\sigma}^{\dagger} c_{p\sigma} \quad (20.42)$$

Любое состояние можно вывести из вакуума, т.е. любую волновую функцию можно вывести из вакуумной: по определению, $|0\rangle$ соответствует состоянию в котором нет никаких частиц. Состояние с одним бозоном описывается волновой функцией $a^{\dagger}|0\rangle$. Двухчастичное состояние описывается функцией $a_i^{\dagger} a_j^{\dagger}|0\rangle$ (где $i \neq j$), либо $(1/\sqrt{2})(a_i^{\dagger})^2|0\rangle$, и т.д. Ясно, что волновые функции симметричны относительно перестановки индексов i и j , как и положено для бозонов.

В случае фермионов нужно позаботиться о порядке следования операторов рождения, т.к. перестановка мест двух частиц влечет за собой появление множителя (-1) .

20.0.4 Представление наблюдаемых величин

Рассмотрим еще раз проблему выражения симметричных операторов в представлении чисел заполнения. Когда такой оператор действует на состояние Фока, он, вообще говоря, производит линейную суперпозицию фоковских состояний, отличающихся от исходного значениями некоторых из чисел заполнения. Каждое из этих состояний может быть получено путем последовательного применения элементарных операторов рождения и уничтожения, которые увеличивают или уменьшают на единицу заданное число заполнения. Таким образом, любой оператор, каким бы сложным он ни был, в конечном счете можно разложить на сумму произведений операторов рождения и уничтожения, которые пошагово вносят необходимые изменения в значения чисел заполнения.

Теперь мы можем ясно сформулировать процедуру вторичного квантования. Она состоит из двух шагов: на первом мы определяем элементарные операторы рождения и уничтожения и разрабатываем их алгебру; на втором шаге мы найдем правило выражения общего симметричного оператора в виде суммы произведений операторов рождения и уничтожения.

Шаг 1

Определим оператор рождения фермионов c_α^+ для одночастичного состояния $|\psi_\alpha\rangle$, задав его действие на базисные состояния (20.21). Оператор рождения должен удовлетворять следующим требованиям:

- (i) c_α^+ должен увеличить число заполнения состояния N_α на единицу, если $N_\alpha = 0$, и уничтожить состояние (т. е. дать ноль), если $N_\alpha = 1$ (принцип запрета Паули);
- (ii) Состояния $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle$, определенные в уравнении (20.22) должны получаться из “вакуумного состояния”

$$|0\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle \quad (20.43)$$

путем последовательного применения операторов рождения:

$$|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle = |c_{\alpha_1}^+, c_{\alpha_2}^+, \dots, c_{\alpha_N}^+ |0\rangle \quad (20.44)$$

(еще раз напомню, что я не надеваю шляпки на операторы c и c^+ для простоты).

[Этот раздел лучше перенести наверх!](#)

20.0.5 Полевые операторы

Операторы рождения и уничтожения могут быть введены вместе с любым полным набором одночастичных состояний. В

частности, мы можем определить операторы $\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r})$, уничтожающие частицу в собственном состоянии с пространственным положением \mathbf{r} и спином σ . Этот набор операторов в совокупности описывается как оператор поля электрона. Таким образом, мы плавно приходим к квантовой теории поля [6]!

Связь между оператором поля и любым другим набором операторов рождения задается так:

$$\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{r}, \sigma) c_i \quad (20.45)$$

Нетрудно показать, что справедливо следующее:

$$[\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')]_+ = [\hat{\Psi}_\sigma^+(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')]_+ = 0 \quad (20.46)$$

и, аналогично

$$[\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')]_+ = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (20.47)$$

Далее, из (20.34) ясно, что

$$\hat{n}_\sigma(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}_\sigma^+(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) \quad (20.48)$$

есть оператор плотности электронов со спином σ .

20.0.6 Распространение подхода вторичного квантования на наблюдаемые физ. величины

Теперь будем выражать физические наблюдаемые в терминах операторов рождения и уничтожения. Вначале рассмотрим наблюдаемые физ. величины, представленные симметричными одночастичными операторами. Одночастичный оператор $\hat{V}^{(1)}$ состоит из суммы N тождественных операторов \hat{V}_i , действующих только на гильбертово пространство i -того электрона.

1. Пусть некоторый оператор является суммой одночастичных операторов:

$$\hat{V}^{(1)} = \sum_i \hat{V}_i(\mathbf{r}_i) \quad (20.49)$$

Типичный пример - оператор плотности частиц $\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ и оператор кинэнергии (рассмотрим их позже).

Когда \hat{V}_i действует на одноэлектронную волновую функцию $\psi_\alpha(\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ он производит суперпозицию одноэлектронных волновых функций

$$\hat{V}_i \psi_\alpha(\mathbf{r}_i, \sigma_i) = \sum_\beta V_{\beta\alpha} \psi_\beta(\mathbf{r}_i, \sigma_i) \quad (20.50)$$

с амплитудами, получаемыми из уравнения

$$\begin{aligned} V_{\beta\alpha} &\equiv \langle i, \beta | \hat{V}_i | i, \alpha \rangle = \\ &= \sum_{s,t} \int d\mathbf{r}_i \psi_\beta^*(\mathbf{r}_i, t) [V_i]_{t,s} \psi_\alpha(\mathbf{r}_i, s), \end{aligned} \quad (20.51)$$

где у оператора \hat{V}_i введены спиновые индексы (s, t) , а амплитуды не зависят от i .

Используя (20.50) нетрудно увидеть, что полный оператор $\hat{V}^{(1)}$ действуя на одно из базисных состояний (20.44) генерирует суперпозицию состояний в которой каждое занятое одночастичное состояние α_i заменяется состоянием β с амплитудой $V_{\beta\alpha_i}$:

$$\begin{aligned} &\hat{V}^{(1)} |\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N\rangle = \\ &= \sum_\beta \sum_{i=1}^N V_{\beta\alpha_i} |\alpha_1, \dots, \alpha_i \rightarrow \beta, \dots, \alpha_N\rangle, \end{aligned} \quad (20.52)$$

Здесь кет $|\alpha_1, \dots, \alpha_i \rightarrow \beta, \dots, \alpha_N\rangle$ обозначает состояние полученное из $|\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N\rangle$ заменой ψ_{α_1} на ψ_β .

Теперь видно, что $|\alpha_1, \dots, \alpha_i \rightarrow \beta, \dots, \alpha_N\rangle$ получено из $|\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N\rangle$ путем применения операторов c_β^+ и c_{α_i} следующим образом:

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_i \rightarrow \beta, \dots, \alpha_N\rangle = c_\beta^+ c_{\alpha_i} |\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_N\rangle \quad (20.53)$$

Задача: Доказать (20.53)

Возвращаясь к (20.52) мы видим, что действие оператора $\hat{V}^{(1)}$ тождественно действию оператора

$$\sum_{\beta} \sum_{i=1}^N V_{\beta\alpha_i} c_\beta^+ c_{\alpha_i}.$$

На самом деле мы можем распространить суммирование по занятым состояниям α_i суммированием по всем состояниям, поскольку оператор уничтожения пустых состояний даст нулевой вклад:

$$\hat{V}^{(1)} = \sum_{i=1}^N \hat{V}_i = \sum_{\alpha, \beta} V_{\beta\alpha} c_\beta^+ c_\alpha, \quad (20.54)$$

где $V_{\beta\alpha}$ даются ур. (20.51).

Двухчастичные операторы

Увеличивая сложность, рассмотрим двухчастичный оператор $V^{(2)}$, являющийся суммой идентичных операторов \hat{V}_{ij} которые совместно действуют на гильбертовых пространствах двух электронов:

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} \quad (20.55)$$

Обратите внимание на важное условие $i \neq j$, которое исключает то, что фактически было бы одноэлектронным оператором.

Член кулоновского взаимодействия между двумя заряженными частицами является типичным примером такого двухчастичного оператора, а условие $i \neq j$ означает в этом случае, что электрон не взаимодействует сам с собой.

Когда \hat{V}_{ij} воздействует на двухэлектронную волновую функцию $\phi_\alpha(\mathbf{r}_j, s_j)\phi_\beta(\mathbf{r}_i, s_i)$, он производит суперпозицию таких двухэлектронных волновых функций:

$$\hat{V}_{ij}\phi_\alpha(\mathbf{r}_j, s_j)\phi_\beta(\mathbf{r}_i, s_i) = \sum_{\gamma\delta} V_{\gamma\delta\alpha\beta}\phi_\gamma(\mathbf{r}_i, s_i)\phi_\delta(\mathbf{r}_j, s_j), \quad (20.56)$$

где амплитуды $V_{\gamma\delta\alpha\beta}$ получены следующим образом

$$\begin{aligned} V_{\gamma\delta\alpha\beta} &\equiv (\langle i, \gamma | \langle j, \delta |) \hat{V}_{ij} (|j, \alpha\rangle |i, \beta\rangle) = \\ &= \sum_{s, s', t, t'} \int d\mathbf{r}_i \int d\mathbf{r}_j \phi_\gamma^*(\mathbf{r}_i, s) \phi_\delta^*(\mathbf{r}_j, t') \\ &\quad \times [\hat{V}_{ij}]_{t't, s's} \phi_\alpha(\mathbf{r}_j, t) \phi_\beta(\mathbf{r}_i, s), \end{aligned} \quad (20.57)$$

где снова спиновые индексы выписаны явно. Обратите внимание, что эти амплитуды не зависят от i и j . Когда полный оператор $\hat{V}^{(2)}$ действует на одно из базисных состояний (20.44), он порождает суперпозицию состояний, в которой каждая пара занятых одночастичных состояний α_i, α_j заменяется в свою очередь на δ, γ (соответственно) с амплитудой $V_{\gamma\delta\alpha_i\alpha_j}$:

$$\hat{V}^{(2)}|\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_N\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta} \sum_{i \neq j} V_{\gamma\delta\alpha\beta} |\alpha_1, \dots, \alpha_i \rightarrow \delta, \dots, \alpha_j \rightarrow \gamma, \dots, \alpha_N\rangle. \quad (20.58)$$

Теперь заметим, что состояние $|\alpha_1, \dots, \alpha_i \rightarrow \delta, \dots, \alpha_j \rightarrow \gamma, \dots, \alpha_N\rangle$, в котором ϕ_δ и ϕ_γ заменяют ϕ_{α_i} , и ϕ_{α_j} , получается из $|\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_N\rangle$ следующим образом

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_i \rightarrow \delta, \dots, \alpha_j \rightarrow \gamma, \dots, \alpha_N\rangle = \hat{c}_\gamma^+ \hat{c}_\delta^+ \hat{c}_{\alpha_i} \hat{c}_{\alpha_j} |\alpha_1, \dots, \alpha_i, \dots, \alpha_j, \dots, \alpha_N\rangle. \quad (20.59)$$

(Для ясности, иногда, в т.ч. и здесь, я надеваю шляпки на \hat{c}^+ и \hat{c} , чтобы не спутать их с коэффициентами).

Докажем это утверждение. Если пары γ, δ и α_i, α_j не имеют общих элементов, то мы можем изменить порядок четырех операторов в правой части уравнения (20.59) как $(c_\gamma^+ c_{\alpha_j})(c_\delta^+ c_{\alpha_i})$. Согласно уравнению (20.53), две пары операторов выполняют замены $\phi_{\alpha_j} \rightarrow \phi_\gamma$ и $\phi_{\alpha_i} \rightarrow \phi_\delta$ в строках определителя Слэтера, как и требовалось. Аналогичный анализ можно провести и для всех остальных случаев. Например, если $\gamma = \alpha_i$ и $\delta = \alpha_j$ (что равносильно перестановке i -й и j -й строк в исходном слэтеровском определителе, который поэтому меняет знак), тогда четыре оператора в правой части уравнения (20.59) можно преобразовать как $-(c_{\alpha_i}^+ c_{\alpha_i})(c_{\alpha_j}^+ c_{\alpha_j})$, что корректно умножает кет на его правую часть с коэффициентом -1 .

Возвращаясь к уравнению (20.58), теперь мы видим, что действие оператора $\hat{V}^{(2)}$ идентично действию оператора

$$\frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta} \sum_{i \neq j} V_{\gamma\delta\alpha_i\alpha_j} c_\gamma^+ c_\delta^+ c_{\alpha_i} c_{\alpha_j}.$$

Мы можем распространить сумму по занятым состояниям α_i, α_j в сумму по всем состояниям, так как дополнительные члены дают нуль. В результате мы получаем формулу, выражающую двухчастичный оператор как сумму произведений четырех операторов рождений и уничтожений:

$$V^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\alpha^+ c_\beta^+ c_\gamma c_\delta. \quad (20.60)$$

Схематическая диаграмма на рис. (20.1) представляет собой полезное визуальное руководство по построению матричных элементов в уравнении (20.60). Правило состоит в том, что

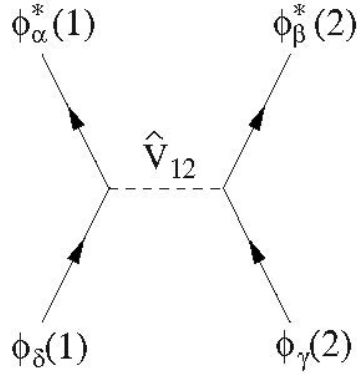


Рис. 20.1: Пояснение к вычислению матричного элемента $V_{\alpha\beta\gamma\delta}$

волновые функции, соответствующие состояниям γ и β , приписываются одной и той же частице, то же самое и для соответствующих состояний α и δ . Более сложные наблюдаемые — действия на группы из трех и более частиц одновременно — также можно описывать аналогичным образом.

20.0.7 Конструирование Гамильтониана в терминах вторичного квантования

Как и в предыдущих лекциях мы рассматриваем материал вначале просто и наглядно, чтобы пояснить то, что мы хотим получить. Затем включаем аппарат вторичного квантования и повторяем более строго.

Для начала напомним одночастичные операторы. Так, оператор кин. энергии одной частицы

$$\frac{p_i^2}{2m} = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla_i^2$$

Другой пример одночастичного оператора - оператор Блоха

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i),$$

в котором $V(\mathbf{r}_i)$ - периодический потенциал решетки.

$$T = \sum_i \frac{p_i^2}{2m}$$

запишем в виде

$$T = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \frac{p^2}{2m} N_{\mathbf{p}, \sigma} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \frac{p^2}{2m} c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} \quad (20.61)$$

С помощью преобразования Фурье можно перейти к $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}^+$. Тогда получаем

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \int \hat{\psi}_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \nabla^2 \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \nabla \psi_{\sigma}^+(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (20.62)$$

Теперь обратимся к потенциальной энергии V и будем считать, что она определяется парным взаимодействием частиц зависящим только от координат:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

Используя выражение для плотности газа точечных частиц

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

Запишем энергию взаимодействия в виде

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \int \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') - \rho(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')], \\ \rho(r) &= \sum_{\sigma} \rho(\mathbf{r}, \sigma), \end{aligned} \quad (20.63)$$

где второй член введен для того, чтобы исключить взаимодействие заряда с самим собой. Используя (20.41) и соотношения коммутации можно привести (20.63) к виду

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (20.64)$$

Предпочтительно пользоваться операторами $c_{\mathbf{p}}$, а не $\hat{\psi}(\mathbf{r})$. Введем фурье-компоненту парного потенциала

$$V_{\mathbf{q}} = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (20.65)$$

Тогда (20.64) можно записать так:

$$V = \frac{1}{2\Omega} \sum_{p\mathbf{k}\mathbf{q}, \sigma, \sigma'} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^{+} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma'}^{+} c_{\mathbf{k}, \sigma'} c_{\mathbf{p}, \sigma} \quad (20.66)$$

Используем этот результат и соотношения коммутации (20.38) для нахождения матричного элемента процесса перехода пары фермионов $(\mathbf{p}, \sigma; \mathbf{k}, \sigma')$ в новые состояния $(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \sigma; \mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma')$:

$$\langle \dots; \mathbf{p} + \mathbf{q}, \sigma; \mathbf{k} - \mathbf{q}, \sigma'; \dots | V | \dots; \mathbf{p}, \sigma; \mathbf{k}, \sigma'; \dots \rangle = V_{\mathbf{q}} - V_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (20.67)$$

при условии, что состояния p и k заняты, а состояния $\mathbf{p} + \mathbf{q}$ и $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ свободны. Первый член соответствует прямому процессу, а второй- обменному процессу, который произойдет когда частицы имеют одинаковый спин.

Таким же манером можно вычислить любую физ. величину в этом представлении. Например, рассмотрим фурье-компоненту плотности

$$\rho_{\mathbf{q}} = \int d^2\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (20.68)$$

Используя (20.39) и (20.41) можно написать

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma} \quad (20.69)$$

20.0.8 Построение Гамильтониана в терминах вторичного квантования

Действуя в модели желе в качестве базиса в одночастичном пространстве выбираем собственные состояния $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ оператора импульса $\hat{\mathbf{p}}$ с собственным значением $\hbar\mathbf{k}$ и z -компонентой спина с собственным значением σ (в единицах $\hbar/2$). Тогда нормированные волновые функции являются плоскими волнами

$$\psi_{k\sigma}(\mathbf{r}, s) = \frac{1}{\sqrt{L^d}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta_{s\sigma} \quad (20.70)$$

Операторы рождения и уничтожения для этого состояния будем обозначать $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^+$ и $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$, соответственно. Кинетическую энергию, имеющую вид (20.54), представим как

$$\begin{aligned} \hat{T} &\equiv \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} \langle \mathbf{k}\sigma | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \mathbf{k}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}'\sigma'} = \\ &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (20.71)$$

Чтобы построить оставшийся член кулоновского взаимодействия, мы сначала вычисляем оператор электронной плотности в представлении вторичного квантования (20.10). Это еще имеет вид (20.54), поэтому сразу получаем

$$\hat{n}_{\mathbf{q}} \equiv \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} = \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} \langle \mathbf{k}\sigma | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{k}'\sigma' \rangle c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}'\sigma'} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (20.72)$$

Подставляя это выражение в член взаимодействия уравнения (20.13), и воспользовавшись правилами антикоммутации для перемещения всех операторов рождения влево, мы приходим к

$$\sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_q [\hat{n}_{-\mathbf{q}} \hat{n}_{\mathbf{q}} - \hat{N}] = \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_q \sum_{\mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \sigma_1}^+ c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} \sigma_2}^+ c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \quad (20.73)$$

Обратите внимание, насколько эффективно формализм вторичного квантования устраняет член с действием самого на себя: $[\hat{N}, \hat{N}] = - \sum_{\mathbf{k} \sigma} c_{\mathbf{k} \sigma}^+ c_{\mathbf{k} \sigma}$ благодаря соответствующему упорядочению операторов рождения.

Объединяя (20.71) и (20.73) получаем окончательную форму гамильтониана в модели желе и в терминах вторичного квантования:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k} \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c_{\mathbf{k} \sigma}^+ c_{\mathbf{k} \sigma} + \frac{1}{2L^d} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_q \sum_{\mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \sigma_1}^+ c_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} \sigma_2}^+ c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}. \quad (20.74)$$

Заметим также, что \hat{H} легко выражается через полевые операторы, определенные в (20.45). В частности, член взаимодействия выглядит так:

$$\hat{H}_{e-e} = \frac{1}{2L^d} \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \sigma_1, \sigma_2} v_q \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \Psi_{\sigma_1}^+(\mathbf{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^+(\mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1). \quad (20.75)$$

20.1 Приближение Хартри-Фока

20.1.1 Энергия основного состояния

Здесь рассматриваем электронную жидкость с учетом эффектов только первого порядка по взаимодействию частиц. Для

однородной системы это эквивалентно приближению Хартри-Фока. Ранее мы это проделывали на квазиклассическом языке, который в силу громоздкости не целесообразно повторять для нахождения всех результатов. Сейчас повторим это в терминах вторичного квантования. Вначале найдем энергию основного состояния, затем с ее помощью определим взаимодействие и свойства квазичастиц.

Гамильтониан системы большого числа фермионов

$$H = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \frac{1}{2} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}\sigma'}^+ c_{\mathbf{p}'\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma}, \quad (20.76)$$

Под действием второго члена в (20.86) соответствующего потенциальной энергии на состояние $|0\rangle$ уничтожается пара частиц $\mathbf{p}\sigma$, $\mathbf{p}'\sigma'$ внутри ферми сферы.

В (20.86) $V_{\mathbf{q}}$ - фурье-компонента потенциала взаимодействия. Для электронной жидкости, погруженной в положительный однородный заряд

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi^2}{q^2} (1 - \delta_{\mathbf{q}0}). \quad (20.77)$$

Дельта-функция в конце этого выражения исключает член с $q = 0$ так как соответствующая часть потенциала компенсируется полем однородного положительного заряда.

Ищем энергию основного состояния, считая, как обычно, что волновые функции основного состояния $|0\rangle$ совпадают с соответствующими функциями для невзаимодействующего ферми-газа. Это соответствует заполнению всех состояний типа плоских волн внутри ферми сферы радиусом p_F . Имеем

$$c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} |0\rangle = n_{\mathbf{p}\sigma}^0 |0\rangle, \quad (20.78)$$

где $n_{p\sigma}^0$ - распределение в основном состоянии:

$$\begin{aligned} n_{p\sigma}^0 &= 1 \quad \text{для } p < p_F, \\ &= 0 \quad \text{для } p > p_F \end{aligned} \quad (20.79)$$

Для нахождения волновой функции и энергии основного состояния мы должны бы решить уравнение Шредингера с таким гамильтонианом (20.86). К сожалению, это невозможно. Нам нужно разработать процедуру приближенного поиска решения. Заметим, что применение второго члена в гамильтониане к волновой функции основного состояния даст только тогда волновую функцию основного состояния, если $q = 0$, либо если $p' - q = p$ и $\sigma = \sigma'$.

Поэтому для решения уравнения Шредингера, при поиске волновой функции основного состояния мы можем использовать гамильтониан:

$$\begin{aligned} H = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p^0 c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{pp'\sigma\sigma'} V_0 c_{p\sigma}^+ c_{p'\sigma'}^+ c_{p'\sigma'} c_{p\sigma} + \\ + \frac{1}{2} \sum'_{pq\sigma} V_q c_{p+q,\sigma}^+ c_{p\sigma}^+ c_{p+q,\sigma} c_{p,\sigma} \end{aligned} \quad (20.80)$$

В третьем члене при суммировании $q \neq 0$. Поскольку речь идет о заряженной электронной ферми-жидкости, то для устойчивости ее необходим однородный, положительно заряженный фон. Поэтому $V_0 = 0$. (Легко догадаться, что нулевая компонента волнового вектора соответствует сдвигу электронной системы как целого относительно компенсирующего фона, что не приводит к появлению полей при наличии однородного компенсирующего заряда и бесконечных размерах системы). Значит, второй член гамильтониана (хартриевский) обращается

нуль. Теперь произведем в третьем члене процедуру “спаривания Хартри-Фока” Заменяем третий член в (20.80) эффективным гамильтонианом

$$H_1^{\text{HFA}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}\sigma} V_q c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{p},\sigma} = - \sum_{\mathbf{p}\sigma} X_{\mathbf{p}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} \quad (20.81)$$

где

$$X_{\mathbf{p}\sigma} = \sum_q \frac{1}{2} V_q \langle 0 | c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} | 0 \rangle$$

. $X_{\mathbf{p}\sigma}$ - действительные (показать), но неизвестные числа. В общем случае мы должны были бы действовать по следующему рецепту: выбрав эти числа произвольным образом, решить уравнение Шредингера. Затем, найдя новый вектор основного состояния, вычислить эти неизвестные числа и приравнять их к затравочно предположенным. Это - точный рецепт процедуры Хартри – Фока. Прелесть ее состоит в том, что нижеприведенный гамильтониан

$$H = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} + H_1^{\text{HFA}}$$

пригоден для нахождения решений. В нашем случае свободного электронного газа с взаимодействием – дело еще упрощается. Структура эффективного гамильтониана точно подобна структуре гамильтониана для частиц без взаимодействия. Поэтому

$$\langle 0 | c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} | 0 \rangle = n_{\mathbf{p}\sigma}^0,$$

где $n_{\mathbf{p}\sigma}^0$ - функция распределения Ферми-Дирака. Следовательно,

$$\langle 0 | H | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}\sigma} V_q n_{\mathbf{p}\sigma}^0 n_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^0 \quad (20.82)$$

Подставляя сюда величины V_q и нормируя E_0^{HFA} на одну частицу, получим

$$\frac{E_0^{\text{HFA}}}{N} = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} - \frac{1}{N} \sum \frac{2\pi e^2}{(p-p')^2}$$

где суммирование ведется по состояниям $p < p_F$, $p' < p_F$. В терминах безразмерного расстояния между частицами r_s :

$$p_F = \frac{4}{9\pi}^{-1/3} \frac{1}{r_s a_B} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s^*}$$

Произведя суммирование, получим:

$$\frac{E_0^{\text{HFA}}}{N} = \frac{2.21}{(r_s^*)^2} - \frac{0.916}{r_s^*} \quad \text{Ry} \quad (20.83)$$

Видно, что обменная энергия отрицательная. Она сопоставима с кинетической при $r_s \approx 1$. Приближение Хартри – Фока отказывает по мере $r_s \rightarrow 1$. Наивная экстраполяция (20.83) к большим r_s приводит к ожиданию неустойчивости при $r_s \approx 3$ в 3D случае. Эта неустойчивость на эксперименте не наблюдается. Заметим, что в приближении Хартри – Фока мы учли корреляции в движении частиц с одним направлением спина $\langle 0 |_{p+q, \sigma p+q, \sigma}^+ | 0 \rangle \neq 0$, т.е., так называемые, кинематические корреляции. Вклад, полученный нами в энергию основного состояния в процедуре Хартри-Фока, носит название обменной энергии. Обменная энергия всегда отрицательна.

Можно было бы продолжать вычисления до членов более высокого порядка по r_s . Тогда получается

$$E_g = \frac{2.209}{r_s^2} - \frac{0.9163}{r_s} - 0.094 + 0.0622 \ln(r_s) + \dots \quad (20.84)$$

Этот результат получен многими методами и многими авторами (включая Gell-Mann , Nozieres и Pines, Quinn) в конце 1950х годов. Все, что за пределами обменной энергии Хартри-Фока принято называть корреляционной энергией, термин был введен Wigner и Seitz в 1930е годы:

$$E_c = -0.094 + 0.0622 \ln(r_s) + \mathcal{O}(r_s) \quad (20.85)$$

Этот результат точен в пределе $r_s \rightarrow 0$. _____

Результат (20.83) можно получить и другими способами. Длинный подробный вывод дан в книге Giulliani и Vignale. Вывод с использованием спаривания Фока изложен в отличном учебнике Mahan “Many particles physics”. Но мы вернемся снова к гамильтониану (20.86) системы большого числа фермионов

$$H = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \frac{1}{2} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}\sigma'}^+ c_{\mathbf{p}'\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma}, \quad (20.86)$$

При действии второго члена в (20.86) соответствующего потенциальной энергии) на состояние $|0\rangle$ уничтожается пара частиц $\mathbf{p}\sigma$, $\mathbf{p}'\sigma'$ внутри ферми сферы. Диагональные члены получаются только в том случае, если эти частицы порождаются операторами $c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}\sigma'}^+$. Это возможно либо при $\mathbf{q} = 0$, либо при $\mathbf{p}' - \mathbf{q} = \mathbf{p}$ и $\sigma = \sigma'$. Поэтому энергия основного состояния равна

$$E_0 = \langle 0|H|0\rangle = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 n_{\mathbf{p}\sigma}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\sigma\sigma'} V_0 \langle 0|c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}'\sigma'}^+ c_{\mathbf{p}'\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma}|0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}\sigma, \mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} \langle 0|c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}|0\rangle \quad (20.87)$$

Коммутируя операторы выражаем (20.87) через функцию распределения

$$E_0 = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{p}}^0 n_{\mathbf{p}\sigma}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\sigma\sigma'} V_0 n_{\mathbf{p}\sigma}^0 (n_{\mathbf{p}'\sigma'}^0 - \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\sigma\sigma'}) - + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}\sigma, \mathbf{q}\neq 0} V_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^0 n_{\mathbf{p}\sigma}^0 \quad (20.88)$$

Второй и третий члены - это вклады первого порядка (по потенциалу) в энергию основного состояния. Второй член можно получить с помощью самосогласованной процедуры Хартри, в которой многочастичную ВФ ищут в виде произведения ядноэлектронных ВФ. Для однородной системы - это просто плоские волны. Третий член - это обменная энергия. Следуя Фоку его вычисляют представляя антисимметризованную

многочастичную ВФ в виде детерминанта составленного из одноэлектронных ВФ. Для однородной системы - это будут снова плоские волны, так что энергия основного состояния в приближении Хартри-Фока будет такой же как и в системе невзаимодействующих частиц.

Подчеркнем, что НФА сводится к первому порядку теории возмущений только для однородной системы. Для электронной жидкости член вычисленный Хартри отсутствует, т.к. однородный положительный заряд компенсирует влияние среднего заряда электрона. Поэтому энергия основного состояния равна

$$\frac{E_0^{\text{HFA}}}{N} = \frac{3}{5} \frac{p_F^2}{2m} - \left(\frac{1}{N} \right) \sum_{p < p_F, p' < p_F} \frac{2\pi e^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} \quad (20.89)$$

Выполняя интегрирование в (20.89) и используя введенные обозначения получим снова тот же результат (20.83).

Литература

- [1] Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах*, М., Мира, 1965. [D. Pines, *Elementary Excitations in Solids*, N.Y. 1963]
- [2] Р. Пайерлс, *Квантовая теория твердых тел*, пер. с англ. М., Изд. Ин.Лит, 1956ю
- [3] D. R. Hartree, Proc. Cambr. Phil. Soc. **24**, 89 (1928).
- [4] V. A. Fock, Zs. Phys. **61**, 126 (1930.)
- [5] Ф. Зейц (F. Seitz), *Современная теория твердого тела*, М. -Л. (1949).
- [6] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, М., Физматлит, 1962.
- [7] G. F. Giuliani and G. Vignale, *Quantum theory of the electron liquid*, Cambridge University Press, 2005. ISBN-13 978-0-521-52796-5
- [8] G. D. Mahan, *Many particle physics*, Kluwer/Plenum 3rd edition (2000). ISBN 0-306-46338-5 (2004).
- [9] Блохинцев, *Введение в квантовую механику*, М., 1976.

- [10] Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, М., Наука, 1967