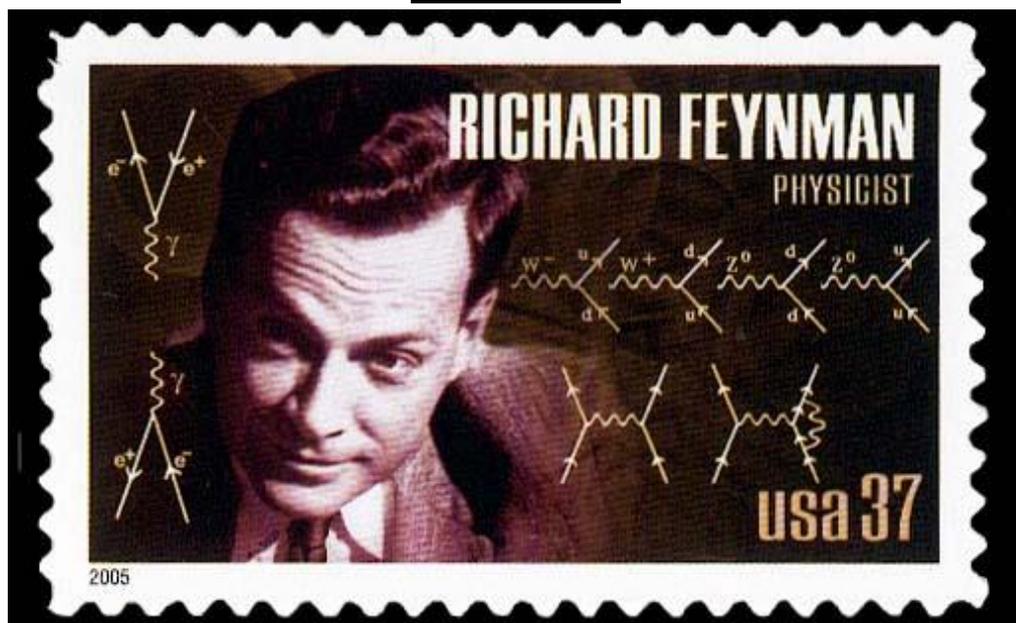


## ВВЕДЕНИЕ



Методы квантовой теории поля, являясь универсальным языком современной теоретической физики, составляют неотъемлемую часть арсенала любого работающего физика. Владение аппаратом гриновских функций и диаграммной техникой позволяет охватить с единой точки зрения широчайший спектр прикладных задач, способствует установлению связей между динамично развивающимися разделами современной физики.

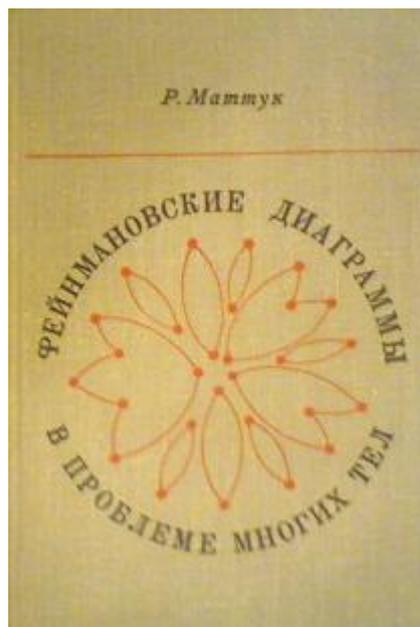
Идеи и методы квантовой теории поля широко распространились за пределы физики элементарных частиц – области, которой они обязаны своим зарождением. Цель данного курса – ознакомление с некоторыми методами квантовой теории поля в физике конденсированного состояния (именно эта область послужит источником рассматриваемых приложений). Полезно сразу осознать, что квантовая теория поля – наука не «ушная», а «ручная», и освоить её методы можно только систематически решая задачи (**«текучка» выделена синим**).

Разбираясь по статьям или книжкам, ориентированным на работающих физиков, вы сразу погружаетесь в предмет и лучше осваиваете его язык. Но бывает и так, что быстрое погружение в предмет оказывается болезненным и даже последним. Помните слова Уилера: «Поспешность – враг успешности».



Из того, что может ориентировать начинающего в предмете, я бы выделил Маттук «Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел». Бегло пролистав эту книжку, вы можете приступить к самостоятельному подбору литературы,

отвечающей вашим интересам, математической подготовке, вкусу, темпу созревания, наконец.



Занимаясь физикой, мы строим модельки того, что вокруг. Идея наипростейшей модельки системы может быть выражена во фразе: «Целое есть сумма частей своих». Такие идеальные системы – системы, части которых никак не взаимодействуют друг с другом (типа идеального газа), занимают весьма почётное место. Подобные модели хороши в качестве первого приближения для описания чего-либо. Однако наиболее удивительные явления возникают исключительно благодаря взаимодействию.

За примерами неидеальных систем (т.е. таких, про которые древние бы сказали что-то типа: «Целое – больше, чем просто сумма частей своих») далеко ходить не надо. Самым известным эффектом, обусловленным электрон-фононным взаимодействием, является электрическое сопротивление – электроны рассеиваются на фонах. Когда фононы рассеиваются на электронах – получаем затухание звука. Интересно также, что электрон-фононное взаимодействие приводит к появлению нового механизма взаимодействия электронов между собой. Вы знаете, что индуцированное фононами взаимодействие между электронами играет важную роль в теории сверхпроводимости. В некоторых ситуациях (когда у фотона большая энергия, а импульс маленький) электрон-фононное взаимодействие является необходимым для поглощения электроном кванта света, а значит, и для набора им энергии в ускоряющем электрическом поле, – фононы являются поставщиками импульса.

Последние сто лет научная мысль развивала методы, позволяющие исследовать **системы с взаимодействием**. Основная цель курса заключается в ознакомлении на модельных задачах физики конденсированного состояния с аппаратом функций Грина, который используется во всех областях теоретической и математической физики для решения неоднородных дифференциальных уравнений, возникающих при исследовании таких систем.

### **КАКОВЫ АЛЬТЕРНАТИВЫ МЕТОДУ ФУНКЦИЙ ГРИНА?**

На заре физики твёрдого тела возник метод канонических преобразований. Его идея такова: допустим, гамильтониан системы выглядит как-то так

$$H = \sum_i H(p_i, r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(r_i, r_j, p_i, p_j)$$

Введём новые координаты  $R_i$  и импульсы  $P_i$

$$r_i = r_i(R_1, \dots, R_N, P_1, \dots, P_N)$$

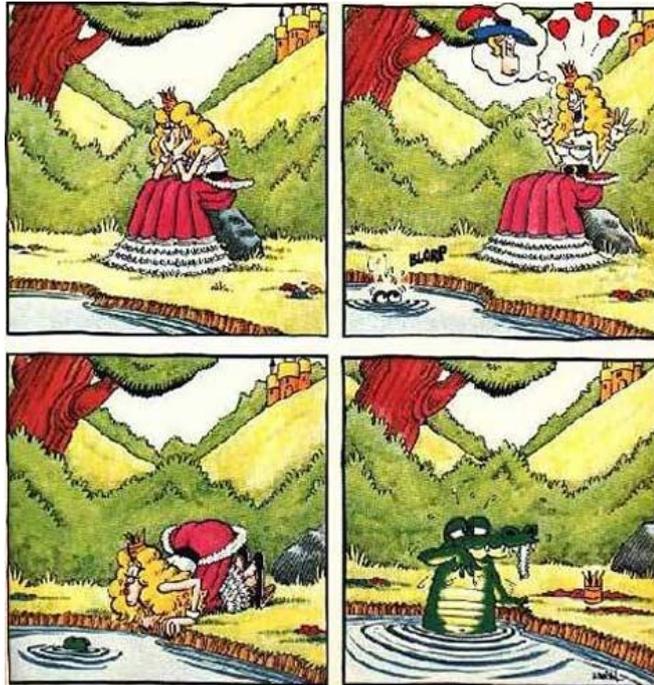
$$p_i = p_i(R_1, \dots, R_N, P_1, \dots, P_N)$$

так, чтобы они удовлетворяли тем же соотношениям коммутации, что и старые координаты и импульсы. Если наш выбор был удачен, то последнее слагаемое в получившемся гамильтониане

$$H = \sum_i \tilde{H}(P_i, R_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \tilde{V}(R_i, R_j, P_i, P_j)$$

окажется настолько малым, что проблему можно будет свести к совокупности  $N$  приближённо независимых задач одного тела с малым возмущением.

Метод канонических преобразований достаточно прост, когда речь идёт, скажем, о двух частицах или о фонахах; его успешно использовали Бом и Пайнс при развитии теории квазиэлектронов и плазмонов в электронном газе. Неприятность состоит в том, что не понятно, как производить каноническое преобразование в общем случае. На рисунке показан весь драматизм краха ожиданий некоторых теоретиков «спастись от гриновских функций» и торжество метода функций Грина над методом канонических преобразований. А хотелось бы иметь систематический способ вычисления энергии основного состояния системы с взаимодействием, энергий и времён жизни элементарных возбуждений и пр. характеристик многочастичной системы. И квантовая теория поля таки даёт этот метод.



Из всех подходов, развитых к настоящему времени в теории многих тел, метод функций Грина является наиболее мощным и универсальным. Он опирается на тот факт, что для нахождения характеристик системы не обязательно обладать информацией о детальном поведении каждой частицы – знания усреднённого поведения одной или двух типичных частиц вполне достаточно. Теперь у вас должен был созреть вопрос:

### **ЧТО ЖЕ ТАКОЕ ГРИНОВСКАЯ ФУНКЦИЯ?**

Начну с замечания принципиального характера. Теоретико-полевые функции Грина и функции Грина, знакомые вам из теории линейных дифференциальных уравнений – суть вещи разные. Напомню, что математические функции Грина (чтобы отделить их от теоретико-полевых собратьев снабдим их прозвищем «математические») – удовлетворяют линейному диффуру, в правой части которого стоит дельта-«функция».

Причины совпадения имён уходят корнями в историю. Дело в том, что теоретико-полевые функции Грина для **свободных** частиц действительно являются математическими функциями Грина для хайзенберговских полевых операторов. Первоначально именно в этом узком смысле и фигурировали функции Грина в теории поля. Физики подружились с этими функциями и наделили их физическим смыслом. Оказалось, что схожим содержанием обладают функции, удовлетворяющие нелинейным дифурам, в правой части которых дельта-«функции». С тех пор теоретико-полевые функции Грина представляют собой более широкий класс функций, чем математические.

Стартуем с математической функции Грина: давайте рассмотрим такой вот **неоднородный дифур**

$$(L - \lambda)u(\xi) = f(\xi)$$

Здесь  $L$  – линейный дифференциальный оператор,  $\lambda$  – постоянная,  $f(\xi)$  – заданная функция. Посмотрите теперь на такое уравнение

$$(L - \lambda)\varphi(\xi) = 0$$

Здесь записано однородное дифференциальное уравнение. Обозначим через  $\varphi_j$  собственную функцию записанного выше уравнения, соответствующую собственному значению  $\lambda_j$ , т.е.

$$(L - \lambda_j)\varphi_j(\xi) = 0$$

Разложим  $u(\xi)$  и  $f(\xi)$  по полной системе функций  $\varphi_j(\xi)$ :

$$u(\xi) = \sum_j \alpha_j \varphi_j(\xi)$$

$$f(\xi) = \sum_j \beta_j \varphi_j(\xi)$$

(Здесь в целях упрощения мы предположили, что собственные значения образуют дискретное множество). Подставим в неоднородный дифур и посмотрим, что получится

$$(L - \lambda) \sum_j \alpha_j \varphi_j(\xi) = \sum_j \beta_j \varphi_j(\xi)$$

Воспользуемся линейностью оператора  $L$ :

$$\sum_j \alpha_j (\lambda_j - \lambda) \varphi_j(\xi) = \sum_j \beta_j \varphi_j(\xi)$$

Ясно, что

$$\alpha_j = \frac{\beta_j}{\lambda_j - \lambda}$$

Пусть мы позаботились о нормировке функций  $\varphi_j(\xi)$  на 1:

$$\int \varphi_i^*(\xi) \varphi_j(\xi) d\xi = \delta_{ij}$$

тогда

$$f(\xi) = \sum_j \beta_j \varphi_j(\xi) \Rightarrow \int f(\xi) \varphi_i^*(\xi) d\xi = \beta_i$$

А решение неоднородного дифура можно выписать в форме

$$\begin{aligned} u(\xi) &= \sum_j \alpha_j \varphi_j(\xi) = \sum_j \frac{\beta_j}{\lambda_j - \lambda} \varphi_j(\xi) = \sum_j \frac{\int f(\xi') \varphi_j^*(\xi') d\xi'}{\lambda_j - \lambda} \varphi_j(\xi) = \\ &= \int f(\xi') \sum_j \frac{\varphi_j(\xi) \varphi_j^*(\xi')}{\lambda_j - \lambda} d\xi' = \int f(\xi') G(\xi, \xi'; \lambda) d\xi' \end{aligned}$$

Буквицей  $G$  обозначена математическая функция Грина для рассматриваемой задачи

$$G(\xi, \xi'; \lambda) = \sum_j \frac{\varphi_j(\xi) \varphi_j^*(\xi')}{\lambda_j - \lambda}$$

Обратите внимание на то, что если числа  $\lambda_j$  вещественны (что обязательно имеет место, если оператор  $L$  эрмитов) и  $\lambda$  вещественно, то

$$G^*(\xi, \xi'; \lambda) = G(\xi', \xi; \lambda)$$

Всмотревшись в

$$u(\xi) = \int f(\xi') G(\xi, \xi'; \lambda) d\xi'$$

можно догадаться, что, подставив в неё в качестве  $f$

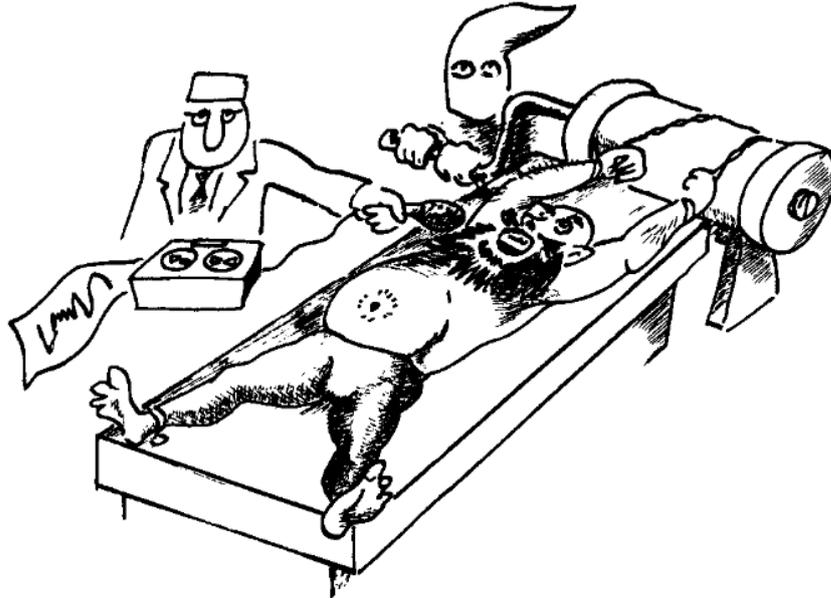
$$f(\xi') = -\delta(\xi' - \xi_0)$$

получим

$$u(\xi) = -\int \delta(\xi' - \xi_0) G(\xi, \xi'; \lambda) d\xi' = -G(\xi, \xi_0; \lambda)$$

Отсюда сразу делаем вывод, что математическая функция Грина удовлетворяет неоднородному диффуру с дельта-«функцией» в правой части

$$(L - \lambda) G(\xi, \xi_0; \lambda) = \delta(\xi - \xi_0)$$



**Figure 1.3.** Response functions are usually measurable experimentally.

(Взято из книжки Цвеллика)

Замечание: в «истинно многочастичных» задачах фигурирует теоретико-полевая функция Грина, которая удовлетворяет внешне похожему уравнению, однако существенным моментом здесь уже является нелинейность оператора.

Обратим внимание ещё вот на что: если

$$\lambda = \lambda_m$$

то неоднородный диффур

$$(L - \lambda) \sum_j \alpha_j \varphi_j(\xi) = \sum_j \beta_j \varphi_j(\xi)$$

принимает вид

$$\sum_j \alpha_j (\lambda_j - \lambda_m) \varphi_j(\xi) = \sum_j \beta_j \varphi_j(\xi)$$

Последнее равенство может иметь место лишь при

$$\beta_m = 0 \text{ или подробнее: } \int \varphi_m^*(\xi) f(\xi) d\xi = 0$$

Последняя формула является необходимым условием того, что в случае

$$\lambda = \lambda_m$$

решение неоднородного дифура имеет найденный нами вид.

Ещё один момент, на который мне бы хотелось обратить ваше внимание: с помощью математических функций Грина можно перейти от однородного дифура к интегральному уравнению. Пример (который нам скоро пригодится)

$$(L + V(\xi) - \lambda)u(\xi) = 0$$

или, пусть  $V(\xi)u(\xi)$  сделает вид, что она не из левой части, тогда

$$(L - \lambda)u(\xi) = -V(\xi)u(\xi)$$

Примем правую часть за  $f(\xi)$  и перепишем уравнение относительно  $u(\xi)$  в интегральном виде

$$u(\xi) = \int G(\xi, \xi'; \lambda) V(\xi') u(\xi') d\xi'$$

**Проблема многих тел**, находящаяся в центре внимания физики конденсированного состояния (и не только), заключается в исследовании влияния характера взаимодействий частиц друг с другом на коллективные свойства составленной из них системы.

Исследования равновесных и неравновесных характеристик системы сопряжены с трудностями, причины которых коренятся в том, что вследствие взаимодействия частицы с другими частицами системы, приходится иметь дело не с состоянием частицы, а с состоянием системы в целом. В узком смысле это можно понимать так: уравнение Шрёдингера со многими переменными не распадается на независимые уравнения для каждой из переменных.

Попытки упростить описание многочастичной системы с взаимодействием привели к разработке методов, опирающихся на представления о почти независимых низколежащих над основным состоянием системы элементарных возбуждениях.



Развитие модельных решений для проблемы многих тел в значительной степени обязано применением методов квантовой теории поля, возникших в процессе становления квантовой электродинамики и мезодинамики с лёгкой руки Фейнмана, Швингера, Дайсона и других хороших (и не очень) людей. И сегодня квантовая теория поля стала необходимым элементом мышления всякого работающего теоретика.

Разработанная техника не только позволила просуммировать широкий класс членов разложения теоретико-полевых величин в ряд теории возмущений, но и указала на простые способы оценки области применимости производимых расчётов к конкретной модели.

Благодаря использованию метода функций Грина удалось достичь ясности в принципиальных вопросах: что представляют собой элементарные возбуждения, и

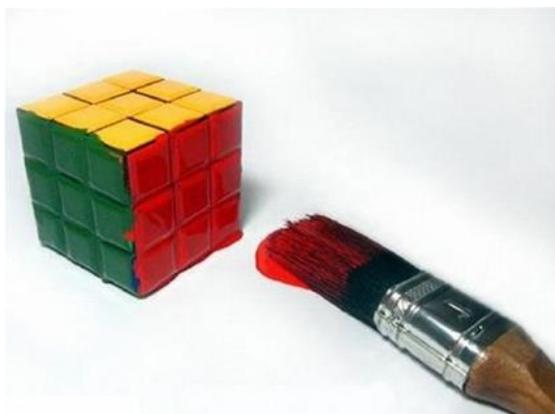
каковы пределы применимости представлений о них. Представление о «квазичастичном» характере некоторых ветвей энергетического спектра системы многих тел вытекает из спектральных теорем, касающихся связи особых точек функций Грина с величинами, определяющими эволюцию системы во времени. Оказывается, что число квазичастиц не является интегралом движения, т.е. волновые функции состояния с заданными числами квазичастиц, вообще говоря, не осциллируют, а затухают. Иначе говоря, идеальный газ квазичастиц описывает не истинно стационарные, а лишь квазистационарные состояния системы, и пользоваться этим представлением можно лишь при достаточно малом затухании – пока ширина уровня мала по сравнению с энергией возбуждения, отнесённой к одной частице. В этом смысле понятие об элементарном возбуждении является приближённым, и метод расчёта, что отрадно, автоматически определяет пределы его применимости, поскольку позволяет определять константы затухания.

Отметим, что в результате эксплуатации концепции элементарных возбуждений удалось охватить с единой точки зрения процессы, происходящие в многочастичных системах, и сформулировать процедуры вычисления физических характеристик с помощью теоретико-полевых величин.



Теперь ПРИЯТНЫЙ СЮРПРИЗ: макроскопически большое число степеней свободы, свойственное задачам квантовой теории поля (бесконечность) и статистической физики (число Авогадро) сблизило эти разделы настолько, что в плане расчётов разницы между ними нет – обе эти дисциплины можно обсуждать в рамках одного и того же формализма.

В качестве ОСНОВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПОЛЕВОГО ОПИСАНИЯ выступают функции Грина и вакуумные амплитуды. Диаграммная техника, позволяющая путём нехитрых манипуляций получить выражение для члена теории возмущений сколь угодно высокого порядка, играет ключевую роль при извлечении информации о системе из этих характеристик. С её помощью можно избежать неприятностей комбинаторного характера при анализе ряда теории возмущений – в итоге задачи решаются легко и красиво.



А теперь небольшое наступление на теорию возмущений. Можно выделить два общих подхода к проблеме построения теории возмущений: временной и стационарный.

Для задач, не содержащих явной зависимости от времени используем стационарный подход. Коротко напомним идею

## ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ РЭЛЕЯ-ШРЁДИНГЕРА

Теория возмущений Рэля-Шрёдингера представляет собой элементарную невременную теорию возмущений. Целью нашего рассмотрения будет получение точных (т.е. справедливых во всех порядках теории возмущений) выражений для возмущённой волновой функции и энергии.

Пусть гамильтониан системы имеет вид

$$H = H_0 + H_1$$

Допустим, что нам известны собственные функции невозмущённой составляющей гамильтониана

$$H_0 |\Phi_j\rangle = E_j |\Phi_j\rangle$$

(например, если речь идёт о системе не взаимодействующих электронов, то это плоские волны, а если они находятся в периодическом потенциале решётки, то модулированные плоские волны). Надо бы выяснить, как влияет возмущение на некоторое невырожденное состояние  $|\Phi_0\rangle$ , для которого

$$H_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle$$

Пусть состояние  $|\Phi_0\rangle$  под действием возмущения преобразуется в состояние  $|X_0\rangle$ . Сказанное означает, что

$$H |X_0\rangle = \hat{E}_0 |X_0\rangle$$

Ермолка над значком энергии означает, что речь идёт о системе с взаимодействием.

Замечание: здесь и далее  $|\Phi_0\rangle$  и  $|X_0\rangle$  обозначены состояния системы без и с взаимодействием соответственно.

$$(H_0 + H_1) |X_0\rangle = \hat{E}_0 |X_0\rangle$$

$$H_1 |X_0\rangle = (\hat{E}_0 - H_0) |X_0\rangle$$

$$\langle \Phi_0 | H_1 | X_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{E}_0 | X_0 \rangle - \langle \Phi_0 | H_0 | X_0 \rangle$$

$$\langle \Phi_0 | H_1 | X_0 \rangle = (\hat{E}_0 - E_0) \langle \Phi_0 | X_0 \rangle \Rightarrow \hat{E}_0 - E_0 = \frac{\langle \Phi_0 | H_1 | X_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | X_0 \rangle}$$

Полученный нами результат, к сожалению, не представляет использовать непосредственно для вычисления поправок к энергии: волновая функция системы с взаимодействием  $|X_0\rangle$  нам не известна.

Отступление:

### ПРОЕКЦИОННЫЙ ОПЕРАТОР

Определение проекционного оператора таково

$$M \equiv |Y\rangle \langle Y|$$

Смысл этой записи станет прозрачным, если мы подействуем оператором  $M$  на некоторый вектор состояния  $|Z\rangle$

$$|Y\rangle \langle Y|Z\rangle$$

Ясно, что получился вектор, направленный вдоль  $|Y\rangle$  и равный по величине (при условии, что вектор  $|Y\rangle$  нормирован на 1) проекции состояния  $|Z\rangle$  на состояние  $|Y\rangle$ . Отличительной чертой проекционного оператора является его **идемпотентность**

$$\boxed{M^2 = M}$$

В этом несложно убедиться, расписав его действие на некоторый вектор состояния  $|Z\rangle$ :

$$|Y\rangle\langle Y|Y\rangle\langle Y|Z\rangle = |Y\rangle\langle Y|Z\rangle$$

Покажите, что если  $M$  – проекционный оператор, то  $\bar{M} \equiv 1 - M$  – также проекционный оператор. О смысле оператора  $\bar{M}$  можно догадаться по смыслу оператора  $M$ , который используется при его построении: при действии  $\bar{M} = 1 - |Y\rangle\langle Y|$  на вектор  $|Z\rangle$  из последнего исключается та его составляющая, которая лежала вдоль вектора  $|Y\rangle$ .

Пусть

$$M = |\Phi_0\rangle\langle\Phi_0| \quad \bar{M} = 1 - M$$

Убедитесь, что

$$\bar{M}|\Phi_0\rangle = 0$$

$$[\bar{M}, E_0 - H_0] = 0$$

КАК ЭТО ВСЁ СРАБОТАЕТ В ПОИСКАХ ПОПРАВКИ К ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ? А вот так:

$$(E_0 - H_0)\bar{M}|X_0\rangle = \bar{M}(E_0 - H_0)|X_0\rangle = \bar{M}(E_0 - \hat{E}_0 + H_I)|X_0\rangle$$

$$\bar{M}|X_0\rangle = \frac{\bar{M}}{(E_0 - H_0)}(E_0 - \hat{E}_0 + H_I)|X_0\rangle \Rightarrow |X_0\rangle = |\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|X_0\rangle + \frac{\bar{M}}{(E_0 - H_0)}(E_0 - \hat{E}_0 + H_I)|X_0\rangle$$

Подставляем последнее выражение в себя, получаем

$$|X_0\rangle = \langle\Phi_0|X_0\rangle \sum_{j=0,\infty} \left[ \frac{\bar{M}}{E_0 - H_0} (E_0 - \hat{E}_0 + H_I) \right]^j |\Phi_0\rangle$$



Покажите, что если

$$[\bar{M}, E_0 - H_0] = 0 \rightarrow \left[ \bar{M}, \frac{1}{E_0 - H_0} \right] = 0$$

Убедитесь, что

$$\frac{1}{E_0 - H_0} |\Phi_j\rangle = \frac{1}{E_0 - E_j} |\Phi_j\rangle$$

Вспоминаем теперь о полученном ранее точном соотношении для поправки к энергии, обусловленной взаимодействием

$$\hat{E}_0 - E_0 = \frac{\langle\Phi_0|H_I|X_0\rangle}{\langle\Phi_0|X_0\rangle}$$

и приходим к соотношению

$$\hat{E}_0 - E_0 = \sum_{j=0, \infty} \left\langle \Phi_0 \left| H_I \left[ \frac{\bar{M}}{E_0 - H_0} (E_0 - \hat{E}_0 + H_I) \right]^j \right| \Phi_0 \right\rangle$$

Каждый член суммы отвечает поправке:  $j=0$  – первого порядка  $\Delta E_0^{(1)}$ ,  $j=1$  – второго порядка  $\Delta E_0^{(2)}$  и т.д. Давайте попробуем что-нибудь посчитать, чтобы понять, что нас раздражает в последней формуле. Видно, что

$$\Delta E_0^{(1)} = \langle \Phi_0 | H_I | \Phi_0 \rangle$$

Убедитесь, что

$$\Delta E_0^{(2)} = \sum_{j=1, \infty} \frac{\langle \Phi_0 | H_I | \Phi_j \rangle \langle \Phi_j | H_I | \Phi_0 \rangle}{E_0 - E_j}$$

Хорошая новость: взглядевшись в поправки, делаем вывод, что их реально посчитать, если знать вид полного гамильтониана, невозмущённые волновые функции и невозмущённые энергетические уровни системы. Плохая новость подкралась с другой стороны: *выпишите поправку третьего, четвёртого порядков*. Если вы попытались, то, наверное, испытаете облегчение, узнав, что диаграммная техника позволит сразу записать результат.

Используя аппарат гриновских функций можно дать

### КЛАССИФИКАЦИЮ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ.

Их, как правило, относят либо к квазичастицам, либо к коллективным возбуждениям, которые возникают вследствие движений системы как целого либо из-за корреляции движений частиц, обусловленных взаимодействием между ними.оборот «как правило» как бы намекает, что не все элементарные возбуждения укладываются в эту схему: в качестве примеров можно привести связанные состояния электронно-дырочной пары – экситоны и бозолонны.

#### ПРИМЕРЫ И ПОЯСНЕНИЯ

Квазичастицу можно представлять себе как голую частицу, которая благодаря взаимодействию, оделась в экранирующую шубу взаимодействующих с ней частиц. Пример: электрон в электронном газе с однородным положительным фоном отталкивает другие электроны и в результате остаётся в окружении положительного экранирующего облака. Такой электрон вместе с облаком представляет собой квазичастицу, называемую квазиэлектроном. О взаимодействии голых частиц друг с другом говорят как о **затравочном взаимодействии**. А о слабом взаимодействии между квазичастицами как об **одетом, эффективном или перенормированном взаимодействии**. Если система поддаётся описанию в рамках простой картины квазичастиц, то её называют **нормальной**. Квазиэлектроны взаимодействуют посредством эффективных короткодействующих сил радиуса порядка среднего расстояния между частицами системы. Ещё пример: электрон проводимости – электрон в периодическом потенциале решётки. И ещё пример: полярон – электрон, двигаясь в полярном диэлектрике, взаимодействует с ионами кристаллической решётки, смещая их из положения равновесия и приводя к локальному возбуждению квантов нормальных колебаний решётки – фононов, которые уже являются примером коллективных возбуждений. В качестве другого примера коллективных возбуждений приведём плазмоны – кванты коллективных колебаний плотности электронов, возникающие в электронной системе благодаря кулоновскому взаимодействию (т.е. в системе, состоящей из невзаимодействующих электронов, никаких плазмонов бы не было). Отметим также, что в системе может существовать несколько видов элементарных возбуждений: так, к примеру, в электронном газе в металлах имеются как квазиэлектроны, так и плазмоны.

## НАПОМИНАНИЕ ИЗ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Большинство рассматриваемых в физике конденсированного состояния систем представляют коллектив из огромного числа частиц. Здесь правят балом статистические закономерности: например, можете оставить надежду предсказать значение скорости выбранной наугад частицы макросистемы, зато довольно хорошо представляете себе их распределение по скоростям.

Есть два способа описать состояние такой весёлой компании: один – термодинамический, другой – статистический.

При ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОМ ОПИСАНИИ мы смотрим на это собрание частиц «свысока», воспринимаем нашу систему макроскопически, и не проявляем сколь-нибудь серьёзного интереса к тем частицам, из которых система состоит. Макросостояние, в котором наша компания может пребывать сколько угодно, называется равновесным – параметры, измеряемые с помощью макроскопических приборов, с течением времени не меняются, потоки любого типа отсутствуют. Одним словом – болото. Равновесное состояние системы фиксируется заданием совокупности независимых параметров, как то – температура, давление, объём и т.д. Выбор параметров определяется способом выделения системы из окружения. Как только хотя бы один параметр меняется, мы говорим, что происходит термодинамический процесс. Вам уже знакомо нулевое начало термодинамики, согласно которому для каждой термодинамической системы существует состояние термодинамического равновесия, которого она при фиксированных внешних условиях с течением времени самопроизвольно достигает. Это утверждение, между прочим, не настолько очевидно, как может на первый взгляд показаться, но чтобы усомниться, надо посмотреть на ситуацию с микроскопической точки зрения – вспомните теорему возврата Пуанкаре.

Здесь самое время напомнить, к чему мы приходим, когда объединяем первое и второе начало термодинамики

$$TdS = d\varepsilon + \sum_j X_j dx_j - \mu dN$$

Смысл обозначений вам, конечно, известен:  $T$  – температура,  $S$  – энтропия системы (которая, кстати, является **функцией состояния системы**, то бишь, если вы её измерите в каком-то состоянии 1 и в каком-то ещё состоянии 2, то разница между полученными результатами не зависит от того, каким образом система перебралась из 1-го состояния во 2-е).  $\varepsilon$  – внутренняя энергия – тоже функция состояния (между прочим, понятно, что складывая или вычитая функции состояния – вы получаете какую-то другую функцию состояния – собственно, такие забавы позволяют понастроить термодинамические потенциалы). Внутренняя энергия коллектива складывается из кинетических энергий всех входящих в него частиц, потенциальной энергии их взаимодействия и, возможно, внутренней энергии самих частиц (этот вклад мы будем игнорировать, поскольку в интересующих нас ситуациях она меняться не будет). Величины  $\{x_j\}$  и  $\{X_j\}$  получили названия по аналогии с механикой – термодинамические «координаты» (например, объём) и сопряжённые к ним «силы» (например, давление).  $N$  – число частиц,  $\mu$  – химический потенциал системы. Этот параметр будет появляться почти в каждой лекции, чтобы не пугаться при встрече с ним, надо понять, что он себя представляет. Взглядевшись в записанное выражение, постигаем смысл **химического потенциала**: он есть не что иное, как изменение энергии изолированной системы постоянного объёма, вызванное изменением в ней числа частиц на единицу.

**СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД** «более внимательный»: на этом уровне рассмотрения вы исходите из микроскопического способа задания системы: помимо фиксации параметров, определяющих макросостояние системы путём конкретизации внешних условий, принимаются во внимание микроскопические характеристики. Необходимые детали содержатся в гамильтониане

$$H = T + U = T + U_{ext} + H_I = H_0 + H_I$$

или соответствующем лагранжиане. Здесь  $T$  – сумма кинетических энергий всех частиц,  $U_{ext}$  – потенциальная энергия взаимодействия частиц с внешними полями,  $U_I \equiv H_I$  – друг с другом. Предполагаются известными массы, заряды, спины, формы потенциалов взаимодействия частиц друг с другом и внешними полями.

Распределение частиц по тем или иным состояниям связано с состоянием коллектива как целого с помощью, так называемой, полной функции распределения

$$F_{\mu,T}(\varepsilon)d\varepsilon,$$

которая выражает число частиц с энергией от  $\varepsilon$  до  $\varepsilon+d\varepsilon$  в системе, состояние которой описывается термодинамическими параметрами  $\mu$  и  $T$ . Её можно представить в виде произведения числа состояний  $g(\varepsilon)d\varepsilon$ , приходящихся на интервал энергии  $d\varepsilon$ , на вероятность заполнения этих состояний частицами  $f(\varepsilon)$ . Эту вероятность называют (просто) **функцией распределения** (по энергии).

В зависимости от того, имеют частицы целый или полуцелый спин они могут являться либо «коллективистами», либо «индивидуалистами». Бозоны живут по принципу: «чем нас больше соберётся, тем нам будет веселей», т.е. они могут неограниченно заселять одно и то же состояние, причём делают это тем «охотнее», чем их больше в этом состоянии. С фермионами дело обстоит иначе: ежели квантовое состояние уже занято фермионом, то никакой другой фермион данного типа не может находиться в этом состоянии. Связь спина со статистикой устанавливается фундаментальной **ТЕОРЕМОЙ ПАУЛИ**.

Обратимся теперь к вопросу о возможности влияния специфики частиц на свойства коллектива, как целого. Для проявления специфики необходимо, чтобы частицы «встречались» друг дружкой как можно чаще, т.е. попадали в одно состояние (если такое возможно) либо в достаточно близкие состояния. Допустим, что есть  $N$  одинаковых частиц и  $W$  различных состояний – комнат в фазовом пространстве, в которых может находиться отдельная частица. Частицы будут «встречаться» редко при условии  $N \ll W$ , в этом случае бозонная или фермионная сущность частиц не имеет возможности себя проявить в свойствах системы. У таких систем есть специальное название – **невырожденные**. Их свойства изучаются в классической статистической физике. Когда же  $N \sim W$ , вопрос «как заселять состояния?», становится актуальным. Системы, для которых справедливо это условие, называют **вырожденными**. Они являются объектом исследования квантовой статистической физики.

Обратите внимание на то, что статистика, которой подчиняются элементарные возбуждения, вовсе не обязана совпадать со статистикой частиц, определяющих эти возбуждения (*приведите примеры*).

Приступим к нашей первой задачке –

## **КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ БОЗЕ-ОСЦИЛЛЯТОР**

– она не только исключительно простая, но и очень важная для квантовой теории поля, поскольку само квантовое поле – это ансамбль из бесконечного числа гармонических осцилляторов, возбуждения которых отождествляются с частицами.

Начнём со стационарного уравнения Шрёдингера

$$\underbrace{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 \right]}_H \psi(q) = \varepsilon \psi(q)$$

Переходим к более удобной записи

$$D \left[ -\frac{d^2}{dQ^2} + Q^2 \right] \psi(Q) = \varepsilon \psi(Q)$$

$$Q = Cq$$

$$\begin{cases} \frac{D}{C^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \\ DC^2 = \frac{m\omega^2}{2} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} D = \frac{\hbar\omega}{2} \\ C = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \end{cases}$$

Вводим операторы  $b$  и  $b^+$ , записываем с их помощью гамильтониан, устанавливаем коммутационные соотношения

$$-\frac{d^2}{dQ^2} + Q^2 = \left( -\frac{d}{dQ} + Q \right) \left( \frac{d}{dQ} + Q \right) - \left( -\frac{d}{dQ} Q + Q \frac{d}{dQ} \right) = 2b^+b + 1 \rightarrow H = \hbar\omega \left( b^+b + \frac{1}{2} \right)$$

$$\left[ q, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} \right] = \left[ Q, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dQ} \right] = i\hbar \rightarrow \left[ Q, \frac{d}{dQ} \right] = -1$$

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\frac{d}{dQ} + Q \right); \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{dQ} + Q \right); \quad [b, b^+] = \left[ \frac{d}{dQ}, Q \right] = 1$$

Перепишем стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hbar\omega b^+b\psi(Q) = \left( \varepsilon - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \psi(Q)$$

Играясь с оператором  $b$ , приходим к определению вакуумного состояния

$$\hbar\omega b^+b\psi_0(Q) = \left( \min \varepsilon - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \psi_0(Q)$$

$$\hbar\omega \underbrace{bb^+}_{1+b^+b} \psi_0(Q) = \left( \min \varepsilon - \frac{\hbar\omega}{2} \right) b\psi_0(Q) \rightarrow \boxed{b\psi_0(Q) = 0}$$

Определяем минимальную энергию осциллятора – энергию нулевых колебаний (слово «нулевых» станет понятным через пару строчек)

$$b^+ [b\psi_0(Q)] = 0 \rightarrow \min \varepsilon = \varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Находим собственную функцию гамильтониана, отвечающую минимальному собственному значению  $\varepsilon_0$

$$\left( \frac{d}{dQ} + Q \right) \psi_0(Q) = 0 \rightarrow \psi_0(Q) = E e^{-\frac{Q^2}{2}}$$

Играемся с оператором  $b^+$  и понимаем, что для нахождения остальных собственных функций гамильтониана дифуры можно уже не решать, осознаём этимологию словосочетаний «нулевые колебания», « $n$ -е возбуждённое состояние» осциллятора, «оператор рождения»

$$\hbar\omega \underbrace{b^+b^+b}_{bb^+-1} \psi(Q) = \left( \varepsilon - \frac{\hbar\omega}{2} \right) b^+ \psi(Q)$$

$$\hbar\omega b^+bb^+ \psi(Q) = \left( \varepsilon - \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \right) b^+ \psi(Q)$$

$$\psi_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \psi_0(Q)$$

$$\varepsilon_n = \left( \frac{1}{2} + n \right) \hbar \omega$$

Этим результатом завершается процедура квантования энергии простого гармонического осциллятора. Однако важно уяснить, что проблема многих тел обсуждается на языке формализма чисел заполнения, поэтому опыт общения с операторами рождения и уничтожения окажется востребованным ещё не раз.

Теперь представьте, что ОСЦИЛЛЯТОРОВ НЕСКОЛЬКО, И ОНИ НЕЗАВИСИМЫ  
Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = \sum_j H_j = \sum_j \hbar \omega_j \left( b_j^+ b_j + \frac{1}{2} \right)$$

Операторы, фигурирующие в нём, удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[b_i, b_j^+] = \delta_{ij}$$

Энергия, соответствующая состоянию

$$\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_N!}} (b_1^+)^{n_1} (b_2^+)^{n_2} \dots (b_N^+)^{n_N} \Phi_0 = \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (b_k^+)^{n_k} \Phi_0,$$

равна

$$\varepsilon = \sum_k \hbar \omega_k \left( n_k + \frac{1}{2} \right)$$

Убедитесь, что

$$\langle \Phi_{n_1 n_2 \dots n_N} | \Phi_{m_1 m_2 \dots m_N} \rangle = \prod_{k=1}^N \delta_{n_k, m_k}$$

$$\langle \Phi_{n_1 n_2 \dots n_N} | b_j^+ | \Phi_{m_1 m_2 \dots m_N} \rangle = \prod_{k \neq j} \delta_{n_k, m_k} \delta_{n_j, m_j+1} \sqrt{m_j+1}$$

$$\langle \Phi_{n_1 n_2 \dots n_N} | b_j | \Phi_{m_1 m_2 \dots m_N} \rangle = \prod_{k \neq j} \delta_{n_k, m_k} \delta_{n_j, m_j-1} \sqrt{m_j}$$