<u>*ИДЕЯ ЧАСТИЧНО-ДЫРОЧНОГО ОПИСАНИЯ ФЕРМИ-СИСТЕМ*</u>

Слон состоит из хобота, ушей и бегемота.

В системе свободных фермионов низшие состояния в $k-$*пространстве заняты вплоть до фермиевского волнового числа* k_F. *Этим состояниям соответствуют волновые функции типа* $\exp(ik\cdot\xi)$. *Если фермионы могут взаимодействовать друг с другом, то некоторые из них могут переходить в состояния с большими значениями импульса. Полезно сосредоточить внимание на отклонении импульсного распределения от первоначального распределения Ферми и описывать возбуждённые состояния системы в терминах частиц, возникающих выше поверхности Ферми и дырок, остающихся внутри этой поверхности. С этой целью введём, для начала, новые операторы*

$$c_k \equiv \begin{Bmatrix} a_k & if & k>k_F \\ a_k^{\dagger} & if & k<k_F \end{Bmatrix} = a_k\theta_{k-k_F} + a_k^{\dagger}\theta_{k_F-k} \quad ; \quad c_k^{\dagger} = \begin{Bmatrix} a_k^{\dagger} & if & k>k_F \\ a_k & if & k<k_F \end{Bmatrix} = a_k^{\dagger}\theta_{k-k_F} + a_k\theta_{k_F-k}$$

где

$$\theta_K = \begin{cases} 1, & if \quad K>0 \\ 0, & if \quad K<0 \end{cases}$$

Убедитесь, что антикоммутационные соотношения для новых операторов рождения и уничтожения можно записать в форме

$$\{c_k, c_{k'}\} = \{c_k^{\dagger}, c_{k'}^{\dagger}\} = 0 \quad ; \quad \{c_k, c_{k'}^{\dagger}\} = \delta_{k,k'}$$

Пусть состояние системы свободных фермионов имеет вид

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{k<k_F} a_k^{\dagger}|0\rangle$$

Убедитесь, что для любых k *справедливо*

$$c_k|\Phi_0\rangle = 0$$

В частично-дырочном описании полностью заполненная сфера Ферми играет роль вакуумного состояния. Чтобы подчеркнуть это говорят о ***ферми-вакууме*** $|\Phi_0\rangle$.

Во многих физических системах плотность фермионов (например, электронов в металле или нуклонов в ядре) велика. Если взаимодействие частиц не слишком сильное, то определяющую роль играет принцип Паули. В этом случае основное состояние системы можно рассматривать как вырожденный ферми-газ. Это означает, что волновые векторы всех занятых состояний $|k\rangle$ *лежат внутри некоторой области* $k-$*пространства, ограниченной поверхностью, отвечающей энергии* ε_F.

Полный энергетический спектр такой системы, как правило, чрезвычайно сложен. Часто, однако, интересны лишь низкоэнергетические уровни, лежащие вблизи основного состояния. Тогда удобно исключить большую постоянную энергию основного состояния и рассматривать вырожденный ферми-газ как «вакуум», а состояния, отвечающие низкоэнергетическим уровням, как возбуждения. Следует заметить, что частицы, образующие вакуум, играют существенную роль в любой теории взаимодействующих фермионов: именно взаимодействие между этими частицами, а также их взаимодействие с любой внешней частицей, движущейся в среде, в основном и определяют физические свойства системы. Хотя число фермионов может быть очень большим, большинство их не может изменить свою энергию из-за принципа Паули (мы, разумеется, предполагаем, что при рассматриваемых взаимодействиях число частиц сохраняется). Оказывается, что значительно проще описывать возбуждённые *состояния как разреженный газ квазичастиц, хотя, как будет видно из дальнейшего, число последних обычно уже не сохраняется.*

Электронные состояния можно разделить на те, которые лежат «над» поверхностью Ферми и «под», в зависимости от того, превышает ли энергия ε_k величину ε_F или нет. В основном состоянии заполнены все уровни с энергиями вплоть до $\varepsilon_k = \varepsilon_F$. В $k-$пространстве эти уровни отвечают некоторому объёму, ограниченному поверхностью Ферми, что мы символически изобразим неравенством

$$k < k_F$$

Такая запись, конечно, имеет смысл, только если поверхностью Ферми является сфера, поэтому в общем случае для произвольной поверхности Ферми правильно писать это условие в форме

$$\varepsilon_k < \varepsilon_F .$$

Покажите, что для N свободных фермионов, каждый из которых может находиться в двух спиновых состояниях, поверхность Ферми представляет собой сферу радиуса

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

Здесь V – объём системы.

Рассмотрите фермионный газ в основном состоянии. Убедитесь, что кинетическая энергия системы из N свободных электронов в объёме V равна

$$T_0 = 0.3 \cdot N \cdot \frac{\hbar^2}{m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

Охарактеризуем систему независимых электронов гамильтонианом

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k$$

Будем предполагать, что все взаимодействия сохраняют число частиц, определяемое следующим образом

$$\boxed{N = \sum_k a_k^\dagger a_k = \sum_{k<k_F} 1}$$

Последняя сумма есть число возможных состояний внутри сферы Ферми.

Определим гамильтониан H_0

$$H_0 \equiv H_0 - \sum_{k<k_F} \varepsilon_k \quad ; \quad \tilde{\varepsilon}_k \equiv \varepsilon_k - \varepsilon_F$$

$$H_0 = \sum_k \left(\tilde{\varepsilon}_k + \varepsilon_F \right) a_k^\dagger a_k - \sum_{k<k_F} \left(\tilde{\varepsilon}_k + \varepsilon_F \right) = \sum_{k>k_F} \tilde{\varepsilon}_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k<k_F} \tilde{\varepsilon}_k a_k^\dagger a_k + \cancel{\varepsilon_F \sum_k a_k^\dagger a_k} - \sum_{k<k_F} \tilde{\varepsilon}_k - \cancel{\varepsilon_F \sum_{k<k_F} 1} =$$

$$= \sum_{k>k_F} \tilde{\varepsilon}_k a_k^\dagger a_k + \sum_{k<k_F} \tilde{\varepsilon}_k \left(a_k^\dagger a_k - 1 \right) = -\sum_{k<k_F} \tilde{\varepsilon}_k a_k a_k^\dagger + \sum_{k>k_F} \tilde{\varepsilon}_k a_k^\dagger a_k = \sum_{k<k_F} \left(-\tilde{\varepsilon}_k \right) c_k^\dagger c_k + \sum_{k>k_F} \tilde{\varepsilon}_k c_k^\dagger c_k$$

Найдите квантовомеханическое среднее по ферми-вакууму $\left\langle \Phi_0 \middle| \widehat{H}_0 \middle| \Phi_0 \right\rangle$.

ПОЛЕВЫЕ ОПЕРАТОРЫ (В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ШРЁДИНГЕРА)

Давайте вооружимся фермионными полевыми операторами $\psi(\xi)$ и $\psi^\dagger(\xi)$: их использование позволит компактнее записать целый ряд соотношений. Определяются они так:

$$\boxed{\psi(\xi)=\sum_j \varphi_j(\xi)a_j \quad ; \quad \psi^\dagger(\xi)=\sum_j \varphi_j^*(\xi)a^\dagger{}_j}$$

Полевые операторы дружат по следующим правилам:

$$\{\psi(\xi),\psi(\xi')\}=\{\psi^\dagger(\xi),\psi^\dagger(\xi')\}=0 \quad ; \quad \{\psi(\xi),\psi^+(\xi')\}=\delta(\xi-\xi')$$

Убедитесь в справедливости выписанных выше антикоммутационных соотношений.

Бывает полезно уже в само определение полевых операторов вшить частично-дырочное описание системы. В связи с этим часто востребованы полевые операторы ψ_-, ψ_+, $(\psi^\dagger)_-$, $(\psi^\dagger)_+$, *определяемые следующим образом*

$$\psi(\xi)=\sum_k \varphi_k(\xi)a_k=\sum_{k<k_F}\varphi_k(\xi)a_k+\sum_{k>k_F}\varphi_k(\xi)a_k$$

$$=\sum_{k<k_F}\varphi_k(\xi)c_k^\dagger+\sum_{k>k_F}\varphi_k(\xi)c_k=\psi_+(\xi)+\psi_-(\xi)$$

$$\psi^\dagger(\xi)=\sum_k \varphi_k^*(\xi)a_k^\dagger=\sum_{k<k_F}\varphi_k^*(\xi)a_k^\dagger+\sum_{k>k_F}\varphi_k^*(\xi)a_k^\dagger=$$

$$=\sum_{k<k_F}\varphi_k^*(\xi)c_k+\sum_{k>k_F}\varphi_k^*(\xi)c_k^\dagger=(\psi^\dagger)_-(\xi)+(\psi^\dagger)_+(\xi)$$

$$\text{В силу свойств ферми}-\text{вакуума}: \qquad \psi_-|\Phi_0\rangle=(\psi^\dagger)_-|\Phi_0\rangle=0$$

Запомнить нижние индексы у ψ_+ *и* ψ_- *просто: они несут инфо о том, из каких частично-дырочных операторов (*$c_k^\dagger$ *или* c_k*) состряпаны полевые операторы при использовании схемы описания с помощью чисел заполнения. В литературе, как правило, скобок при записи* $(\psi^\dagger)_-$ *не расставляют, т.е. пишут так* $\psi_-^\dagger$, *подразумевая при этом простое правило, которое идейно близко к привычке одевать сначала штаны, а потом уже ботинки: верхняя нотация выполняется первой.*

Верно ли, что $(\psi^\dagger)_-\neq(\psi_-)^\dagger \quad ; \quad (\psi^\dagger)_+\neq(\psi_+)^\dagger$ *?*

Говорят, что «полевой оператор $\psi^\dagger(\xi)$ *рождает частицу в точке* ξ*», имея в виду следующее. Подействуем* $\psi^\dagger(\xi)$ *на вакуум* Φ_{vac}*:*

$$\psi^\dagger(\xi)\Phi_{vac}=\sum_j \varphi^*{}_j(\xi)a^\dagger{}_j\Phi_{vac}=\sum_j \varphi^*{}_j(\xi)\varphi_j(\xi_1)=\delta(\xi-\xi_1)$$

При действии полевым оператором $\psi^\dagger(\xi)$ *на любую N-электронную однодетерминантную функцию получается подобный результат.*

Из полевых операторов можно сколотить ***оператор плотности частиц***

$$\psi^\dagger(\xi)\psi(\xi)$$

который внешне напоминает плотность вероятности $\varphi^*\varphi$ *для частицы в состоянии* φ.

Оператор полного числа частиц *в ферми-системе определяется интегралом*

$$\int\psi^\dagger(\xi)\psi(\xi)d\xi$$

Несложно убедиться, что выписанный объект по праву так зовётся:

$$\int\psi^\dagger(\xi)\psi(\xi)d\xi=\int\sum_{k,l}\varphi_k^*(\xi)a_k{}^\dagger\varphi_l(\xi)a_l d\xi=$$

$$=\sum_{k,l}a_k{}^\dagger a_l\int\varphi_k^*(\xi)\varphi_l(\xi)d\xi=\sum_k a_k{}^\dagger a_k$$

Каждый член суммы является оператором числа частиц в $k-$*м состоянии, его собственные значения равны числам заполнения, сумма которых и даёт полное число частиц в системе.*

Используем полевые операторы для того, чтобы записать H_0 и H_I. Точкой отсчёта будут гамильтонианы «в крестах».

$$H_0 = \sum_{ij} \langle i|h|j\rangle a^\dagger{}_i a_j = \sum_{ij} a^\dagger{}_i a_j \int \varphi_i^*(\xi) h(\xi) \varphi_j(\xi) d\xi =$$

$$= \int \sum_i a^\dagger{}_i \varphi_i^*(\xi)\, h(\xi) \sum_j a_j \varphi_j(\xi)\, d\xi = \int \psi^\dagger{}_i(\xi) h(\xi) \psi_j(\xi) d\xi$$

Аналогично проверьте, что

$$H_I = \frac{1}{2}\sum_{ijkl} \langle ij|u|kl\rangle a^\dagger{}_i a^\dagger{}_j a_l a_k = \frac{1}{2}\int d\xi_1 d\xi_2 \quad \psi^\dagger(\xi_1)\psi^\dagger(\xi_2) u(\xi_1,\xi_2)\psi(\xi_2)\psi(\xi_1)$$

УНИТАРНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Всякое унитарное преобразование операторов и волновых функций позволяет перейти к другим, одинаково законным, формулировкам квантовомеханической проблемы (подробности см. в Лекциях 10-11 курса «Элементы квантовой механики»). Так получается благодаря тому, что физически важные свойства квантовомеханической системы определяются матричными элементами операторов, а унитарное преобразование оставляет неизменным матричные элементы всех операторов, т.е. матричные элементы оператора O, взятые между $|i\rangle$, $|f\rangle$, совпадают с матричными элементами преобразованного оператора O', взятыми между преобразованными векторами состояний $|i'\rangle$, $|f'\rangle$:

$$\left.\begin{array}{l} |i'\rangle = u|i\rangle \\ |f'\rangle = u|f\rangle \rightarrow \langle f'| = \langle f|u^\dagger \\ O' = uOu^\dagger \end{array}\right\} \rightarrow \langle f'|O'|i'\rangle = \langle f|u^\dagger u O u^\dagger u|i\rangle = \langle f|O|i\rangle$$

Здесь через u обозначен унитарный оператор, т.е. такой оператор, для которого

$$uu^+ = u^+u = 1$$

Ввиду того, что

$$O|i\rangle = \lambda|i\rangle \rightarrow u^+O'u|i\rangle = \lambda|i\rangle \rightarrow O'u|i\rangle = u\lambda|i\rangle \qquad \text{или} \qquad O'|i'\rangle = \lambda|i'\rangle$$

можно использовать любые, удобные для нас, унитарные операторы, поскольку в фокусе нашего внимания находятся собственные значения операторов.

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Не секрет, что во многих практически важных случаях гамильтониан системы можно представить как сумму невозмущённого гамильтониана, который отвечает системе невзаимодействующих друг с другом частиц, и возмущённой части, учитывающей взаимодействия между этими частицами

$$H = H_0 + H_I$$

Уравнение Шрёдингера тогда можно записать в виде

$$i\frac{\partial|X(t)\rangle}{\partial t} = (H_0 + H_I)|X(t)\rangle$$

В этом представлении, называемом представлением Шрёдингера, операторы от времени не зависят, а функции состояния – зависят. Допустим, нам известно решение $|\Phi(t)\rangle$ уравнения Шрёдингера с «выключенным» взаимодействием (т.е. когда $H_I = 0$)

$$i\frac{\partial|\Phi(t)\rangle}{\partial t} = H_0|\Phi(t)\rangle$$

Его можно представить в виде эволюционировавшего начального состояния $\left|\Phi\left(t_0\right)\right\rangle$ *системы без взаимодействия (про то, что «без» напоминает верхний индекс* 0 *у оператора эволюции)*

$$\left|\Phi(t)\right\rangle = U^{(0)}\left(t-t_0\right)\left|\Phi\left(t_0\right)\right\rangle$$

Оператор эволюции состояния системы без взаимодействия удовлетворяет уравнению

$$i\frac{\partial U^{(0)}(t)}{\partial t} = H_0 U^{(0)}(t),$$

решение имеет вид экспоненциала

$$U^{(0)}(t) = \exp\left(-iH_0 t\right)$$

Представим искомую функцию $\left|X(t)\right\rangle$ *в виде*

$$\left|X(t)\right\rangle = U^{(0)}(t)\left|\hat{X}(t)\right\rangle$$

Запись выше можно воспринимать, как определение кет-вектора $\left|\hat{X}\ t\right\rangle$. *В новых терминах уравнение Шрёдингера для системы с взаимодействием примет вид*

$$i\frac{\partial U^{(0)}(t)}{\partial t}\left|\hat{X}(t)\right\rangle + iU^{(0)}(t)\frac{\partial\left|\hat{X}(t)\right\rangle}{\partial t} = \left(H_0 + H_I\right)U^{(0)}(t)\left|\hat{X}(t)\right\rangle$$

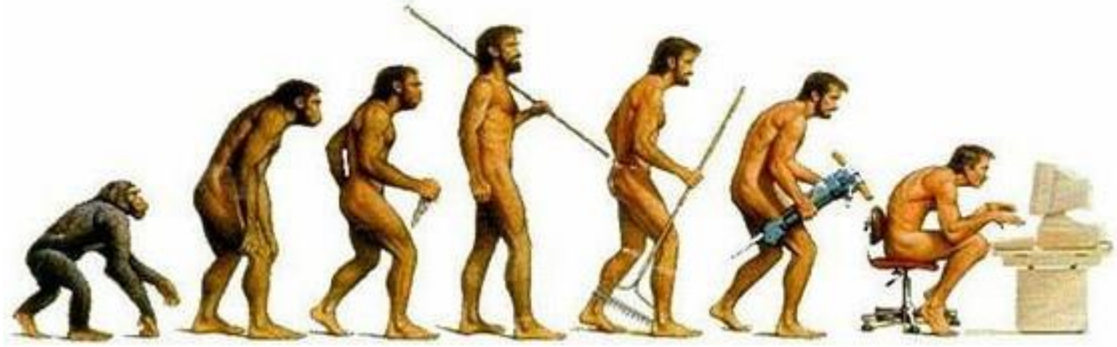
В результате приходим к

$$\boxed{\begin{aligned} & i\frac{\partial\left|\hat{X}(t)\right\rangle}{\partial t} = \hat{H}_I\left|\hat{X}(t)\right\rangle \\ & \hat{H}_I = \left[U^{(0)}(t)\right]^{-1} H_I U^{(0)}(t) \\ & \left|\hat{X}(t)\right\rangle = \left[U^{(0)}(t)\right]^{-1}\left|X(t)\right\rangle \\ & U^{(0)}(t) = \exp\left(-iH_0 t\right) \end{aligned}}$$

Договоримся надевать шляпу на оператор, записанный в представлении взаимодействия

$$\boxed{\hat{O} = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}}$$

Объясните, почему оператор H_0 *в представлении взаимодействия имеет тот же вид, что и в шрёдингеровском представлении.*



Найдём теперь оператор эволюции $\tilde{U}\left(t,t_0\right)$, *переводящий* $\left|\hat{X}\left(t_0\right)\right\rangle$ *в* $\left|\hat{X}(t)\right\rangle$:

$$\left|\hat{X}(t)\right\rangle = \tilde{U}\left(t,t_0\right)\left|\hat{X}\left(t_0\right)\right\rangle$$

Оператор этот нам пригодится, когда будем производить разложение одночастичной функции Грина в ряд теории возмущений. Зацепимся за соотношение

$$\left|\hat{X}(t)\right\rangle = \left[U^{(0)}(t)\right]^{-1}\left|X(t)\right\rangle$$

В момент t_0 *оно имеет вид*

$$\left|\hat{X}(t_0)\right\rangle = \left[U^{(0)}(t_0)\right]^{-1}\left|X(t_0)\right\rangle$$

Используем связь

$$\left|X(t)\right\rangle = U(t,t_0)\left|X(t_0)\right\rangle$$

Последние три соотношение подставим в предшествующее им, в итоге получим

$$\left[U^{(0)}(t)\right]^{-1}U(t,t_0)\left|X(t_0)\right\rangle = \tilde{U}(t,t_0)\left[U^{(0)}(t_0)\right]^{-1}\left|X(t_0)\right\rangle$$

$$\left[U^{(0)}(t)\right]^{-1}U(t,t_0) = \tilde{U}(t,t_0)\left[U^{(0)}(t_0)\right]^{-1}$$

$$\left[U^{(0)}(t)\right]^{-1}U(t,t_0)U^{(0)}(t_0) = \tilde{U}(t,t_0)$$

Приходим к соотношению

$$\boxed{\tilde{U}(t,t_0) = \exp(iH_0 t)U(t-t_0)\exp(-iH_0 t_0)}$$

Обратите внимание, что оператор $U(t)$ *и оператор* $U^{(0)}(t)$ *– разные операторы. Напомню, что*

$$H = H_0 + H_I$$

$$i\frac{\partial\left|X(t)\right\rangle}{\partial t} = H\left|X(t)\right\rangle \qquad i\frac{\partial\left|\Phi(t)\right\rangle}{\partial t} = H_0\left|\Phi(t)\right\rangle$$

$$\left|X(t)\right\rangle = U(t-t_0)\left|X(t_0)\right\rangle \qquad \left|\Phi(t)\right\rangle = U^{(0)}(t-t_0)\left|\Phi(t_0)\right\rangle$$

$$U(t-t_0) = \exp\left(-iH(t-t_0)\right) \qquad U^{(0)}(t-t_0) = \exp\left(-iH_0(t-t_0)\right)$$

Замечание: выписанное выше представление оператора $U(t)$ *в виде операторной экспоненты получается аналогично тому, как получается представление для оператора* $U^{(0)}(t)$ *в виде операторной экспоненты.*

Распишем полностью оператор эволюции $\tilde{U}$

$$\tilde{U}(t,t_0) = \exp(iH_0 t)\exp\left(-iH(t-t_0)\right)\exp(-iH_0 t_0)$$

Применима ли эта формула, если оператор H_I *явно зависит от времени?*

Возникает соблазн просто сложить показатели экспонент, однако

$$\exp(A)\exp(B) \neq \exp(A+B) \qquad \text{если} \qquad [A,B] \neq 0$$

Пользуясь определением операторной экспоненты, убедитесь в справедливости этого утверждения. Так что если

$$\left[H,H_0\right]\neq 0 \quad \text{или, что эквивалентно,} \quad \left[H_I,H_0\right]\neq 0,$$

то «слить» показатели экспонент не получится.

Убедитесь в справедливости следующих свойств оператора эволюции $\tilde{U}$

$$\boxed{\begin{aligned}&\tilde{U}(t_1,t_3)\tilde{U}(t_3,t_2)=\tilde{U}(t_1,t_2)\\&\tilde{U}^+(t_1,t_2)=\tilde{U}(t_2,t_1)\\&\tilde{U}(t_1,t_2)\tilde{U}^+(t_1,t_2)=1\end{aligned}}$$

Однако вернёмся к уравнению

$$i\frac{\partial\left|\hat{X}(t)\right\rangle}{\partial t}=\hat{H}_I\left|\hat{X}(t)\right\rangle$$

Из него можно получить уравнение для оператора эволюции $\tilde{U}$

$$i\frac{\partial\tilde{U}(t,t_0)}{\partial t}=\hat{H}_I(t)\tilde{U}(t,t_0)$$

А отсюда уже приходим к записи

$$\tilde{U}(t,t_0)=\tilde{U}(t_0,t_0)-i\int_{t_0}^{t}\hat{H}_I(t_1)\tilde{U}(t_1,t_0)dt_1$$

Для $\tilde{U}(t_1,t_0)$ *можно написать аналогичное выражение*

$$\tilde{U}(t_1,t_0)=\tilde{U}(t_0,t_0)-i\int_{t_0}^{t_1}\hat{H}_I(t_2)\tilde{U}(t_2,t_0)dt_2$$

Подставим его в предыдущее выражение, получим в результате

$$\tilde{U}(t,t_0)=\tilde{U}(t_0,t_0)-i\int_{t_0}^{t}\hat{H}_I(t_1)\left[\tilde{U}(t_0,t_0)-i\int_{t_0}^{t_1}\hat{H}_I(t_2)\tilde{U}(t_2,t_0)dt_2\right]dt_1=$$

$$=\tilde{U}(t_0,t_0)-i\tilde{U}(t_0,t_0)\int_{t_0}^{t}\hat{H}_I(t_1)dt_1+i^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\tilde{U}(t_2,t_0)$$

Продолжая в том же духе и учитывая

$$\tilde{U}(t_0,t_0)=1$$

получаем разложение оператора эволюции $\tilde{U}$

$$\boxed{\begin{aligned}&\tilde{U}(t,t_0)==\sum_{n=0,\infty}\tilde{U}_n(t,t_0)=\\&=1-i\int_{t_0}^{t}\hat{H}_I(t_1)dt_1+i^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)-i^3\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\int_{t_0}^{t_2}dt_3\hat{H}_I(t_1)\hat{H}_I(t_2)\hat{H}_I(t_3)+\ldots\end{aligned}}$$

Обратите внимание на то, что порядок сомножителей в подынтегральном выражении существенен, поскольку коммутатор

$$\left[\hat{H}_I(t_1),\hat{H}_I(t_2)\right]$$

совсем не обязан равняться нулю.