Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1963

И. П. БАЗАРОВ

МЕТОД САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ И МОДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА КРИСТАЛЛА

В работе [1] рассматривалась система с модельным гамильтонианом

$$H = \sum_k T(k)\, a_k^+ a_k + \frac{1}{2V} \sum_q \lambda(q)\, \rho_q \rho_{-q},$$

где k — импульсы частицы, $T(k) = \frac{k^2}{2m} - \mu$, V — объем системы, $\lambda(q)$ — Фурье-компонент потенциальной энергии взаимодействия между частицами, a_k^+ и a_k — операторы порождения и исчезновения частиц, $\rho_q = \sum_k a_{k+q}^+ a_k$ — Фурье-компонент квантовой плотности, μ — химический потенциал и вектор q принимает не квазинепрерывные, а дискретные значения, соответствующие периодам обратной решетки кристалла.

Основной интерес рассмотрения такого гамильтониана состоял в том, что для него, как показано в [1], удается получить асимптотически точное решение.

В настоящей статье, используя введенные в [2] для исследования статистических систем двухвременные запаздывающие и опережающие функции Грина и их спектральные представления, мы хотим установить связь между полученным в [1] точным уравнением в модельной задаче кристалла и уравнением Хартри для определенных состояний статистической системы.

Рассмотрим систему из N одинаковых бесспиновых Ферми-частиц с энергией взаимодействия $\Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$, заключенных в макроскопическом объеме V.

Гамильтониан такой системы будет

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{1 \leqslant i < j \leqslant N} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \tag{1}$$

или в представлении вторичного квантования

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^+(\vec{r})\, \Delta\psi(\vec{r})\, d\vec{r} +$$

$$+\frac{1}{2}\int \Phi(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)\,\psi^+(\vec{r}_1)\,\psi^+(\vec{r}_2)\,\psi(\vec{r}_2)\,\psi(\vec{r}_1)\,d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2, \qquad (2)$$

где $\psi(\vec{r})$, $\psi^+(\vec{r})$ — операторные полевые функции в представлении Шредингера.

Определим согласно [2] двухвременные функции Грина

$$G_s^\alpha(t-\tau;\ x_1, x_2, \ldots, x_s; x_1', x_2', \ldots, x_s';\ y,\ y') \equiv \langle\langle A(t),\ B(\tau)\rangle\rangle_s^\alpha, \qquad (3)$$

$$(\alpha = ret,\ adv,\ c;\ s = 1, 2, \ldots),$$

где

$$A(t) = \psi^+(t, x_1') \ldots \psi^+(t, x_s')\,\psi(t, x_s) \ldots \psi(t, x_1),$$

$$B(\tau) = \psi^+(\tau, y')\,\psi(\tau, y) \qquad (4)$$

и $\psi(t, x)$, $\psi^+(t, x)$ — полевые функции в представлении Гейзенберга при гамильтониане $H_\mu = H - \mu N$ (μ — химический потенциал), определяемые уравнениями движения с этим гамильтонианом.

На основе теоремы о вариации среднего значения можно установить связь между Фурье-образами функций Грина в E-представлении $\mathfrak{G}_s^\alpha(E; x_1,\ldots,x_s; x_1', \ldots, x_s'; y, y')$ и одновременными квантовыми функциями распределения комплексов частиц

$$D_s(t; x_1, x_2, \ldots, x_s; x_1', \ldots, x_s') =$$

$$= \langle \psi^+(t, x_1'), \ldots, \psi^+(t, x_s')\,\psi(t, x_s), \ldots, \psi(t, x_1) \rangle,$$

где $\psi(t, x)$, $\psi^+(t, x)$ — полевые функции в представлении Гейзенберга, а усреднение проводится по произвольному статистическому оператору $D(x_1, \ldots, x_N;\ x_1', \ldots, x_N')$:

$$\langle A \rangle = \mathrm{Sp}\,AD.$$

Используя эту связь, в работе [3] путем варьирования уравнения Хартри получено приближенное уравнение для определения $\mathfrak{G}_1^\alpha$:

$$\hbar E\mathfrak{G}_1^\alpha(E;\ x_1,\ x_1';\ y,\ y') = \Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{r_1} - \Delta_{r_1'}) +$$

$$+ U(r_1) - U(r_1')\Big\}\,\mathfrak{G}_1^\alpha(E;\ x_1, x_1';\ y,\ y') + D_1^0(x_1\, x_1')\int\{\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) -$$

$$- \Phi(|\vec{r}_1{}' - \vec{r}_2|)\}\,\mathfrak{G}_1^\alpha(E;\ x_2, x_2;\ y,\ y')\,dx_2 +$$

$$+ \frac{1}{2\pi}[\delta(x_1 - y)\,D_1^0(y', x_1') - \delta(x_1' - y')\,D_1^0(x_1, y)], \qquad (5)$$

где

$$U(r) = \int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)\,D_1^0(x', x')\,dx' \qquad (6)$$

$$(x = r)$$

и $D_1^0(x_1, x_1')$ — равновесная функция распределения (средняя плотность).

Умножая (5) на $e^{-iE(t-\tau)}$ и интегрируя по всей вещественной оси E, получим

$$i\hbar\,\frac{\partial G_1^\alpha(t-\tau, x_1, x_1', y, y')}{\partial t} = \Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{r_1} - \Delta_{r_1'}) +$$

$$+ U(r_1) - U(r_1')\Big\}\,G_1^\alpha(t-\tau,\ x_1, x_1',\ y,\ y') +$$

$$+ D_1^0(x_1, x_1') \int \{\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) - \Phi(|\vec{r}_1' - \vec{r}_2|)\} G_1^\alpha(t-\tau, x_2, x_2, y, y')\, dx_2 +$$

$$+ 2\pi\delta(t-\tau)\{\delta(x_1 - y) D_1^0(x_1', y') - \delta(x_1' - y') D_1^0(x, y)\}. \qquad (7)$$

Легко убедиться, что

$$i\hbar(G_1^c - G_1^{ret}) = \langle \psi^+(\tau, y)\, \psi(\tau, y')\, \psi^+(t, x_1')\, \psi(t, x_1)\rangle,$$

поэтому, вычитая из (7) при $\alpha = c$ то же уравнение при $\alpha = ret$, найдем:

$$i\hbar \frac{\partial \langle \psi^+(\tau, y)\, \psi(\tau, y')\, \psi^+(t, x_1')\, \psi(t, x_1)\rangle}{\partial t} =$$

$$= \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_{r_1} - \Delta_{r_1'}) + U(r_1) - U(r_1')\right\} \langle \psi^+(\tau, y)\psi(\tau, y')\, \psi^+(t, x_1')\psi(t, x_1)\rangle +$$

$$+ D_1^0(x_1, x_1') \int \{\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2'|) -$$

$$- \Phi(\vec{r}_1' - \vec{r}_2)\} \langle \psi^+(\tau, y)\, \psi(\tau, y')\, \psi^+(t, x_2)\, \psi(t, x_2)\rangle\, dx_2. \qquad (8)$$

Уравнения (5) и (8) справедливы во всей области изменения переменных x_1, x'_1, y, y', то есть для всех состояний статистической системы.

Рассмотрим такое положение, когда в этих уравнениях пара точек с координатами x_1, y достаточно удалена от другой пары точек, определяемых переменными x_1', y'. Согласно принципу ослабления корреляции [4] в этом случае можно осуществить расцепление

$$\langle \psi^+(\tau, y)\, \psi(\tau, y')\, \psi^+(t, x_1')\, \psi(t, x_1)\rangle \rightarrow$$

$$\rightarrow \langle \psi^+(\tau, y)\, \psi(t, x_1)\rangle \langle \psi(\tau, y')\, \psi^+(t, x_1')\rangle. \qquad (9)$$

Тогда уравнение (8) распадается на два уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial \langle \psi^+(\tau, y)\, \psi(t, x_1)\rangle}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r_1} + U(r_1) - \mu\right\} \langle \psi^+(\tau, y)\, \psi(t, x_1)\rangle,$$

$$i\hbar \frac{\partial \langle \psi(\tau, y')\, \psi(t, x_1')\rangle}{\partial t} = -\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{r_1'} + U(r_1') - \mu\right\} \langle \psi(\tau, y')\, \psi^+(t, x_1')\rangle, \qquad (10)$$

где $\mu = \mu(t, \tau)$ — разделительная функция, равная постоянной величине, если операторные полевые функции определяются как представления Гейзенберга с гамильтонианом большого ансамбля H_μ.

Будем решать уравнения (10) и найдем связь между получаемым при этом уравнением Хартри и асимптотически точным уравнением в модельной задаче кристалла [1].

Для этого разложим $\psi(t, x)$ по ортонормированным функциям $\varphi_n(x)$ оператора энергии с самосогласованным полем:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x)\right)\varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x),$$

$$U(x) = \int \Phi(|x - x'|)\, D_1^0(x', x')\, dx',$$

$$\frac{1}{V}\int \varphi_m^*(x)\, \varphi_n(x)\, dx = \delta_{m,n}. \qquad (11)$$

Тогда

$$\psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_n \varphi_n(x) a_n(t),$$

$$\psi^+(\tau, y) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_m \varphi_m(y) a_m(\tau).$$

На основании перестановочных соотношение для $\psi(x, t)$ находим

$$a_n a_m + a_m a_n = 0,$$

$$a_n a_m^+ + a_m^+ a_n = \delta_{m,n}$$

Выражение для $U(x)$ поэтому запишется в виде

$$U(x) = \frac{1}{V} \sum_{m,n} \int \Phi(|x - x'|) \langle a_m^+ a_n \rangle \varphi_m^*(x') \varphi_n(x') \, dx'.$$

Среднее значение $\langle a_m^+ a_n \rangle$ найдем, используя (10).

Так как

$$\langle \psi^+(\tau, y) \psi(t, x) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{m,n} \varphi_n(x) \varphi_m^*(y) \langle a_m^+(\tau) a_n(t) \rangle,$$

то согласно первому уравнению (10) и уравнению (11) имеем

$$i\hbar \sum_{m,n} \varphi_n(x) \varphi_m^*(y) \frac{\partial < a_m^+(\tau) a_n(t) >}{\partial t} = \sum_{m,n} (E_n - \mu) \varphi_n(x) \varphi_m^*(y) \langle a_m^+(\tau) a_n(t) \rangle$$

и

$$i\hbar \frac{\partial < a_m^+(\tau) a_n(t) >}{\partial t} = (E_n - \mu) \langle a_m^+(\tau) a_n(t) \rangle, \qquad (12)$$

откуда

$$\langle a_m^+(\tau) a_n(t) \rangle = \langle a_m^+ a_n \rangle \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - \mu)(t - \tau)}.$$

Аналогично, исходя из второго уравнения (10) и уравнения (11) получаем

$$i\hbar \frac{\partial < a_n(\tau) a_m^+(t) >}{\partial t} = -(E_m - \mu) \langle a_n(\tau) a_m(t) \rangle, \qquad (13)$$

откуда

$$\langle a_n(\tau) a_m^+(t) \rangle = \langle a_n a_m^+ \rangle \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - \mu)(t - \tau)},$$

или (заменяя $\tau \to t$, $t \to \tau$)

$$\langle a_n(t) a_m^+(\tau) \rangle = \langle a_n a_m^+ \rangle \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m - \mu)(t - \tau)}. \qquad (14)$$

На основании формул (12), (13) и спектральных представлений для усредненных по большому ансамблю произведений операторов [2] имеем:

$$\langle a_m^+(\tau) a_n(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega) e^{-i\omega(t-\tau)} d\omega = \langle a_m^+ a_n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - \mu)(t - \tau)},$$

$$\langle a_n(t)\, a_m^+(\tau)\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} I(\omega)\, e^{\frac{\omega\hbar}{\theta}}\, e^{-i\omega(t-\tau)}\, d\omega = \langle a_n a_m^+\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(E_m-\mu)(t-\tau)},$$

откуда спектральная интенсивность $I(\omega)$ равна

$$I(\omega) = \langle a_m^+ a_n\rangle\, \delta\left(\omega - \frac{E_n-\mu}{\hbar}\right)$$

и

$$\langle a_n a_m^+\rangle = \langle a_m^+ a_n\rangle\, e^{\frac{E_n-\mu}{\theta}}\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)(t-\tau)}. \tag{15}$$

Из соотношения (15) непосредственно видно, что если $E_m \neq E_n$, то $\langle a_m^+ a_n\rangle = \langle a_n a_m^+\rangle = 0$ и если $E_m = E_n$, то $\langle a_n a_m^+\rangle = \langle a_m^+ a_n\rangle \cdot e^{\frac{E_n-\mu}{\theta}}$, причем, когда $n \neq m$, то учитывая $\langle a_n a_m^+\rangle + \langle a_m^+ a_n\rangle = 0$, получаем

$$\left(e^{\frac{E_n-\mu}{\theta}} + 1\right)\langle a_m^+ a_n\rangle = 0$$

и

$$\langle a_m^+ a_n\rangle = \langle a_n a_m^+\rangle = 0;$$

когда же $n = m$, имеем

$$\langle a_n a_n^+\rangle = \langle a_n^+ a_n\rangle \cdot e^{\frac{E_n-\mu}{\theta}}$$

и

$$\langle a_n^+ a_n\rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_n-\mu}{\theta}} + 1}. \tag{16}$$

Таким образом, для определения функций φ_n получаем следующее уравнение Хартри с самосогласованным потенциалом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_n + U(r)\,\varphi_n = E_n\varphi_n,$$

$$U(r) = \int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}\,'|)\, \rho(\vec{r}\,')\, d\vec{r}\,', \tag{17}$$

$$\rho(\vec{r}) = D_1^0(x, x) = \frac{1}{V}\sum_n \frac{1}{e^{\frac{E_n-\mu}{\theta}} + 1}\, \varphi_n^*(\vec{r})\, \varphi_n(\vec{r}).$$

Это уравнение для состояний статистической системы, когда в уравнениях (5) и (8) соответствующие пары аргументов удалены друг от друга, совпадает с асимптотически точным уравнением, найденным в работе [1] для модельного гамильтониана кристалла при периодическом самосогласованном потенциале.

Таким образом, выбор специальной модели кристалла [1] эквивалентен операции расцепления (9) при решении уравнения (5) и соответствует таким состояниям статистической системы, в которых отсутствуют коллективные движения частиц.

Изучение коллективных возбуждений в системе (кристалле) возможно на основе анализа уравнения (5) в общем случае, или в случае кинетического уравнения для вариации квантовой функции распределения, что будет составлять содержание другой работы.

Выражаю глубокую благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за обсуждение работы и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Базаров И. П. ДАН СССР, **140**, 85, 1961; Bazarov I. P. Physica, **28**, 479, 1962.

2. Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В. ДАН СССР, **53**, 1959.

3. Боголюбов Н. Н. (мл.), Садовников Б. И. «Вестн. Моск. ун-та», сер. физики и астрономии, № 2, 1963.

4. Боголюбов Н. Н. Квазисредние в задачах статистической механики. Объединенный институт ядерных исследований. Дубна, 1961, стр. 51.

Поступила в редакцию
3. 5 1963 г.

Кафедра
статистической физики
и механики