

КВАНТОВОПОЛЕВАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1980.

В книге последовательно развиваются основы квантовой теории поля применительно к рассмотрению элементарных возбуждений в твердом теле (электронов, фононов, экситонов, плазмонов, магнонов и др.) и взаимодействий между ними.

По мере изложения автор знакомит читателя с современными методами квантовополевой теории твердого тела. Построение формального аппарата проводится на примерах конкретных проблем, при этом постоянно уделяется внимание физической стороне дела.

Приведенные в книге задачи с указаниями к их решению позволяют читателю активно овладеть изложенным материалом.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода	5
Предисловие автора	8
Указания к чтению книги	10
Глава I. Вступление	11
§ 1. Введение и обзор	11
§ 2. Некоторые основные понятия классической механики	17
Глава II. Гармонические осцилляторы	21
§ 3. Квантовомеханический осциллятор: операторы рождения и уничтожения	21
§ 4. Вычисление средних значений	30
§ 5. Об обращении с бозонными операторами: мы учимся некоторым приемам	37
§ 6. Смещенный гармонический осциллятор: прообраз элементарных возбуждений в твердом теле	47
Глава III. Квантование поля	55
§ 7. Линейная цепочка, атомов: классическое рассмотрение	55
§ 8. Линейная атомная цепочка: квантотеоретическое рассмотрение. Фононы	62
§ 9. Переход к континууму: классическое рассмотрение	67
§ 10. Переход к континууму: квантотеоретическое рассмотрение. Фононы	77
§ 11. Трехмерные проблемы: квантование скалярного волнового уравнения и электромагнитного поля. Фотоны	83
§ 12. Квантование шредингеровских волновых полей, подчиняющихся статистике Бозе (вторичное квантование). Бозоны	94
§ 13. Квантование шредингеровских волновых полей, подчиняющихся статистике Ферми — Дирака: Фермионы	104
§ 14. Об обращении с ферми - операторами	113
§ 15. Взаимодействие между полями: электроны, «танцующие на канате»	123
§ 16. Методические приемы: представление взаимодействия и представление Гейзенберга	130

Глава IV. Электроны в «замороженной» решетке	140
§ 17. Электроны в кристаллической решетке: краткое изложение теории Блоха	140
§ 18. Метод эффективной массы	145
§ 19. Функции Ваннье: волновые пакеты из функции Блоха	149
§ 20. Электроны в кристаллической решетке: формулировка проблемы многих тел. Приближение Хартри — Фока	150
§ 21. Электронные дырки	160
§ 22. Взаимодействие между электронами и дырками	166
§ 23. Экситоны с большим радиусом (экситоны Ваннье)	176
§ 24. Экситоны Френкеля	182
§ 25. Волны электронной поляризации	191
§ 26. Экситонная материя	198
§ 27. Плазмоны	200
§ 28. Спиновые волны: Магноны	207
Глава V. Взаимодействие электронов с колебаниями решетки	219
§ 29. Гамильтониан Фрëлиха для взаимодействия между электронами и фононами	219
§ 30. Нестационарная теория возмущений (первый порядок). Спонтанное и индуцированное испускание и поглощение фононов. Представление с помощью диаграмм Фейнмана	226
§ 31. Электрическое сопротивление	235
§ 32. Нестационарная теория возмущений (второй порядок): собственная энергия, перенормировка массы	244
§ 33. Теория возмущений высших порядков	251
§ 34. Теорема о точной форме решения	255
§ 35. Полярон Фрëлиха. Собственная энергия и перенормированная масса	258
§ 36. Эффективное взаимодействие между поляронами	262
Глава VI. Функции Грина	268
§ 37. Теория возмущений в координатном пространстве. Возникновение функций Грина	268
§ 38. Функция распространения, пропагатор, функция Грина — все одно и то же	275
§ 39. Примеры уравнений для функций Грина и их решение	280
Глава VII. Сверхпроводимость	294
§ 40. Основные экспериментальные факты, касающиеся сверхпроводимости	294
§ 41. Теория сверхпроводимости: введение фрëлиховского взаимодействия между электронами	299
§ 42. Основное состояние сверхпроводника по теории Бардина — Купера — Шриффера (БКШ)	305
§ 43. Возбужденные состояния сверхпроводника	314
Глава VIII. Взаимодействие электронов с квантованным электромагнитным полем	319

§ 44. Взаимодействие между излучением и веществом: оператор	319
§ 45. Поляритоны	324
Литература для дальнейшего чтения	332
Список обозначений	336

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Амплитуда вероятности 108	— —, производные 76
Антинормально упорядоченная функция 40	Диаграммы 229
Антисимметричная волновая функция 111	— связанные 255
Атомная цепочка линейная 55	Длина когерентности 298
Елоховская волна 142	— свободного пробега средняя 242
Бозе-операторы 37	Закон дисперсии волны в атомной цепочке 57
— частицы 51	— — для двухатомной линейной цепочки 62
Бозоны 94, 100 Бра 33	— — — одномерного континуума 09
Вакуумное состояние 99	— — скалярного волнового уравнения 85
Валентная зона 143	— Ома 241
Вариационная производная 72	Запрещенная зона 143
Векторный потенциал 85	Звуковые волны 11
Вероятность перехода полная 108	Зоны энергетические 142
Вершина 229	Измеримые величины 31
Взаимодействие полей 123	Изолятор 144
— точечных зарядов 196	Испускание виртуальное 230
— электронов с квантованным полем излучения 319	— индуцированное фононов 226, 232
— — — — колебаний решетки 219	— фонона спонтанное 228
Внутреннее поле 207	Калибровочное преобразование 86
Волновое уравнение, квантование 83	Канонически сопряженный импульс в континууме 73
— — одномерное 68	k -правило отбора 144
— — трехмерное 83	Квазичастица 280
Время жизни полярона 292	Квантование волнового уравнения 87
— соударения 240	— шредингеровского волнового поля 98
Гармонический осциллятор 21	— — — —, подчиняющегося статистике Ферми — Дирака 104
— — под внешним воздействием 47	— — — —, — — — —, вторичное 94
Глубина проникновения 296	— электромагнитного поля 86
Граничные условия циклические 68	Кет 33
Групповая скорость 143	Когерентные состояния 50, 66, 81
Двухатомная линейная цепочка 62	Колебания ионов в F-центре (центр окраски) 48
Двухуровневый атом во внешнем электрическом поле 123	Конденсация Бозе — Эйнштейна 198
δ -функция Дирака 71	
— —, представления 76	

Кронекера символ 27
Кулоновская калибровка 86
— обменная энергия 102
Кулоновский оператор 103
Кулоновское обменное
 взаимодействие 158, 172
Куперовская пара 306
Магнетон Бора 207
Магنون 14, 207
Матричный элемент гармонического
 осциллятора 36
Метод Ли — Лоу — Пайнса 259
— Эренрейха — Коэна 201
Модель Гайтлера — Лондона 207
Молекула водорода 207
Молекулярный кристалл 182
Наложение волновых функций 38
Нормально упорядоченная функция
 39
Нормировочный множитель
 осцилляторной функции 34
Нулевая энергия 27, 29
— — электромагнитного поля 92
Обменный интеграл 209
— оператор Гамильтона 210
Оператор Гамильтона
 взаимодействия электронов с
 квантованным полем излучения
 319
— — колебаний атомной цепочки в
 континуальном пределе 79
— — — непрерывного
 распределения электронов 128
— — — решетки и электронов в
 металлах 226
— — несвязанных осцилляторов 26
— — — смещенных гармонических
 осцилляторов 53
— — сверхпроводимости 306
— — электронной дырки 163
— — электронов и дырок 167
— — — поляризонных колебаний
 и электронов 222
— координаты 101

— Лапласа 83
— отклонения 65
— плотности числа частиц 100
— рождения 21
— трансляции 140
— уничтожения 21
— числа частиц 80
Операторная функция 39
— — экспоненциальная 39
Основное состояние гармонического
 осциллятора 26
— — сверхпроводника, энергия 313
Перенормированная масса полярона
 261
Перенормировка массы 244, 250
Перестановочные плюс-соотношения
 105
— соотношения в континуальном
 пределе 78
— — для бозе-операторов 24, 28
— — — гармонического осциллятора
 22
Перестановочные соотношения для
 операторов линейной цепочки
 64
— — — скалярного волнового
 уравнения 84
— — — ферми-частиц 105
— — — шредингеровского
 волнового поля 98
— — — электромагнитного поля 89,
 91
— — между ψ и ψ^+ , фермионные 106
Периодические граничные условия
 55
Плазменная частота 201
Плазменные колебания 200
Плазмой 16, 200
Плотность гамильтониана 85
— тока 297
Поглощение 226
Поглощения зона 144
— кривая 144
Поле 67

- , квантование 55
- Полнос функции Грина 279
- Поляризациснные волны 12
 - — электронные 191
 - колебания 12
 - —, квантование 219
- Поляризация, облако 250
- Полярисон 13, 324
- Полярный кристалл 219
- Полярон 16, 250, 258
 - электронный 251
- Поляроны, взаимодействие между ними 262
- Потенциал 17
 - , вид для смещенного гармонического осциллятора 48
- Потенциальная энергия во внешнем поле, оператор 102
- Правило вычисления волновых векторов 144
- Представление взаимодействия 130, 226
 - Гейзенберга 130
- Преобразование Боголюбсва 117, 316
 - Хольштейна — Примакова 217
 - ферми-операторов линейное 116
- Приближение Бсма — Пайнса 204
 - случайных фаз 205
- Примесный атом 54
- Принцип Кондона 54
 - Паули 100, 207
 - суперпозиции 57
- Проводимость 241
- Проводник 144
- Производная в континууме 72
- Пропагатор 275
- Разложение по собственным функциям 97, 127
- Сверхпроводимость 294
- Сверхпроводник, возбужденное состояние 314
 - жесткий 298
 - мягкий 298
 - , основное состояние по теории Бардина—Купера—Шриффера 305
- , энергетическая щель 318
- Смещенный гармонический осциллятор 47
- Собственная функция гармонического осциллятора 26
 - энергия 26
 - —, диаграмма 274
 - — полярона 292
 - — частицы 195
- Собственное состояние несвязанных осцилляторов 29
- Собственные состояния уравнения Шредингера электромагнитного поля 92
- Состояние 24
- Спин 207
 - 1/2 в магнитном поле 122
- Спиновые волны 14, 207, 214
 - операторы 209
- Среднее значение для фермионов 111
 - — амплитуды когерентного состояния 82
 - —, вычисление 31
- Ступенчатая функция 281
 - —, производная 282
- Суперпозиция волновых функций 38
- Сфера Ферми 14
- T-оператор 280 T-произведение 281
- Температура перехода T_c 294
- Теорема Блоха 142
- Теория Блоха 140
 - возмущений в координатном пространстве 268
 - — нестационарная, второй порядок 244
 - — —, высшие порядки 251
 - — —, первый порядок 226
- Унитарное преобразование 44
- Упругая постоянная 21
- Уравнение Больцмана 239
- Уравнение вынужденных колебаний

струны 125
— движения Ньютона 17
— — — атомной цепочки 55
— колебаний свободной струны 124
— Пуассона 87
— струны 68
— Шредингера атомной цепочки 65
— — временное 130
— — — гармонического осциллятора 30
— — Двух частиц 111
— — — квантованного шредингеровского волнового поля 99, 106
— — n частиц 111
— — проблемы многих электронов в твердом теле 151
Уравнения Гамильтона 17
— — в непрерывном пределе (струна) 74
— — для линейной цепочки 58
— Лагранжа 17
— — в континуальном пределе 73
— Лондонов 295
— Максвелла в вакууме 85
Условие Лоренца 86
Фейнмановские диаграммы 226
Ферми-операторы 113
— — осциллятор смещенный 115, 122
Фермионный оператор уничтожения в представлении Гензенберга 138
— —, уравнение 137
Фермионы, квантование 104
Ферромагнетизм, модель Гейзенберга 210
Фононы 12, 62
— в континууме 77
Фотоны 83
Фрёлиховский гамильтониан взаимодействия между электронами и фононами 219
Фрёлиховское взаимодействие 299

Функция Ваннье 149
— Гамильтона 17
— — вынужденного гармонического осциллятора, классическая 138
— — линейной цепочки 58
— — — — в непрерывном пределе (струна) 74
— — система электроны + непрерывное поле 126
— — скалярного волнового уравнения 84
— — шредингеровского волнового поля 95
Функция Гамильтона электромагнитного поля 88
— Грина 268, 275, 280
— — многоэлектронной проблемы 280
— —, определение 276
— — полярона 286
— — свободной частицы 277
— Лагранжа 17
— — континуума 70
— — системы электроны + колебания континуума 125
— — скалярного волнового уравнения 83
— — шредингеровского волнового поля 96
— — электромагнитного поля 87
— распространения 275
— состояния избыточного электрона 159
— — невзаимодействующих фермионов 106
Фурье-интеграл 76
— образ функции Грина 279
— преобразование 61
— -ряд непрерывной функции 75
Хартри приближение 285
Хартри — Фока метод 150
— — приближение 286
Числа заполнения 106
— — при тепловом равновесии для

бозе-частиц 238
Экситон Ваннье 176
— Френкеля 182
—, операторы рождения и
уничтожения 187
—, энергетическая схема 181
Экситонная молекула 198
Экситонное вещество 198
Экситонные капли 199
Электрическая индукция 221
Электрическое сопротивление 235

Электронная дырка 160
Электрон-электронное
взаимодействие в
сверхпроводнике 304
Элементарный магнит 207
Эрмитово-сопряженный оператор 34
Эффективная масса 143
— —, метод 145
Эффект Мейсснера — Оксенфельда
284
— Холла аномальный 166

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Одной из центральных концепций современной теоретической физики твердого тела является концепция элементарного возбуждения или квазичастицы. Элементарные возбуждения не являются привилегией лишь твердого тела. Они могут возникать в других многочастичных системах: ядрах, плазме и т. д. Твердое тело представляет собой один из примеров системы многих частиц, специфика которой состоит в том, что между частицами действуют силы электрического происхождения и что довольно часто можно провести достаточно четкое разделение всей системы на подсистемы, каждая из которых обладает характерными особенностями и которые могут взаимодействовать друг с другом. Поэтому твердое тело как объект исследования особенно интересно разнообразием существующих в нем элементарных возбуждений. Понятие квазичастицы весьма успешно используется для объяснения всей совокупности тепловых, электрических, магнитных, оптических и других свойств кристаллов (и не только кристаллов), а такие фундаментальные явления, как, например, электросопротивление и сверхпроводимость, удалось описать как результат взаимодействия элементарных возбуждений различной природы.

Концепция элементарного возбуждения в теоретической физике твердого тела возникла с внедрением в нее методов квантовой теории поля, которые сами при этом претерпели определенные изменения. Изложение тех или иных вопросов приложения квантовополевых методов в теоретической физике твердого тела можно найти в целом ряде монографий и учебных пособий, написанных советскими и зарубежными авторами. Среди них книга западногерманского профессора Х. Хакена «Квантовополевая теория твердого тела», перевод которой предлагается читателю, занимает особое место. Профессор Хакен предпринял попытку и, скажем сразу, удачную попытку изложить лишь наиболее общие и фундаментальные, важные в идейном отношении разделы квантовополевой теории твердого тела, причем не просто изложить, а просчитать от начала до конца, с тем чтобы начинающий читатель уловил не только идейную основу подхода, но и разобрался в методах, используемых в квантовополевой теории твердого тела.

Чтобы выполнить эту задачу, автору, как он сам говорит об этом в предисловии, пришлось провести строгий отбор материала и освободиться от всего того, что не является принципиально важным для понимания существа дела. Совершенно очевидно, что отбор проводился по двум направлениям: выбор материала и стиль его подачи. Выбор материала, естественно, несет явный отпечаток склонностей самого автора, который известен своими работами по теории электронов и фононов в твердом теле. Здесь нет смысла пересказывать содержание книги. Следует лишь отметить несколько моментов. Очень полезный для общей ориентации материал изложен в шестой главе о функциях Грина. Здесь устанавливается связь между теорией возмущений, функциями Грина и функциями распространения.

Последняя, восьмая глава, посвященная взаимодействию электронов с квантованным полем электромагнитного излучения, написана менее удачно. Она довольно схематична и при ее чтении возникает впечатление, что она добавлена лишь для «полноты».

Автор излагает материал в свободной разговорной манере, довольно конспективно, что, впрочем, не следует считать недостатком изложения, тем более, что во всех важных для понимания моментах вычислений или при пояснении физики проблемы автор не жалеет места.

С методической точки зрения следует признать особенно удачным постоянное стремление автора построить гамильтониан задачи, исходя из функций Лагранжа, так как именно этот момент обычно опускается другими авторами и поэтому особенно труден для начинающего читателя. При этом очень четко формулируется исходная модель, которая выбирается для рассмотрения. Развитие аппарата идет на примерах решения конкретных проблем и постоянно сопровождается углублением в физику вопроса. По понятным причинам все эти моменты изложения в монографиях и тем более в оригинальной литературе опускаются, что создает дополнительные трудности для неспециалиста читателя.

В результате профессору Хакену удалось написать книгу, которую в состоянии освоить читатель, имеющий знания по высшей математике в объеме технического вуза и знакомый с основами квантовой механики. Стиль книги позволяет думать, что полученные читателем знания будут достаточно основательными и активными, чему способствуют приведенные в конце параграфов задачи с указаниями к их решению. Внимательное прочтение этой книги подготовит читателя к работе над более фундаментальными руководствами и монографиями (см. список литературы для дальнейшего чтения в конце книги) и позволит читать оригинальную литературу. При дальнейшем чтении читатель

сможет познакомиться и с обобщенным откликом системы на внешнее воздействие и его выражением через функции Грина и корреляционные функции и с основами теории необратимых явлений, одним словом, со всеми теми вопросами, которые являются неотъемлемой частью современной теории твердого тела, но которые остались за рамками этой книги.

При подготовке русского издания этой книги проф. Хакеп любезно прочитал корректуру и внес в текст книги некоторые уточнения.

В целом книга профессора Х. Хакепа «Квантовополевая теория твердого тела» будет полезна широкому кругу читателей, приступающих к изучению твердого тела: студентам, аспирантам и специалистам, работающим в других областях физики.

Г. Жданов

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА

Физика твердого тела является одним из обширных основных разделов сегодняшней физики. Твердое тело, с его сложными электрическими, оптическими, тепловыми и магнитными свойствами, представляет собой чрезвычайно привлекательный объект современных фундаментальных исследований. Действительно, здесь удается объяснить и проследить во всех подробностях очень сложные явления. Связанное с этим глубокое понимание физических процессов в твердом теле приводит, кроме того, к в высшей степени важным применениям, как, например, в области вычислительной техники и техники связи.

Студент, который хотел бы овладеть этим разделом физики, очень быстро, конечно, установит, что в нем в большом объеме используются представления и методы квантовой теории поля. Эти методы позволяют не только элегантно описать физические процессы в твердом теле, но и приводят к принципиально новым познаниям. В качестве замечательного примера упомянем здесь объяснение сверхпроводимости.

С другой стороны, в курсе лекций, например по квантовой механике, студенту вряд ли предоставляется возможность познакомиться с квантовой теорией поля. Задача этой книги состоит в том, чтобы устранить этот пробел и простым путем подвести читателя к ее основным понятиям и методам. Читатель, знакомый с математикой в объеме трех первых семестров и основными понятиями квантовой механики, с помощью этой книги в состоянии освоить квантовополевую теорию твердого тела.

При построении понятий, с которыми мы будем иметь дело, речь пойдет преимущественно о так называемых элементарных возбуждениях, таких как фононы, экситоны, магноны, поляроны, поляритоны, электронные дырки. На протяжении всей книги мы будем систематически развивать эти понятия и разрабатывать лежащие в их основе физические представления.

Далее, квантовая теория поля характеризуется применением известных математических методов, таких как так называемая диаграммная техника, методы функций Грина, а также определенные методы решения уравнения Шредингера. Поскольку на протяжении последних лет возникли целые направления или, точнее сказать, школы, которые отдают предпочтение тому или иному методу, то читателю следует предоставить возможность в равной степени познакомиться с этими методами. Мы надеемся, что по прочтении этой книги читатель сможет читать как

специальные монографии (см. список литературы для дальнейшего чтения в конце книги), так и оригинальные работы.

Вообще же квантовая теория поля применима не только в физике твердого тела. Столь же широко она применяется в ядерной физике, физике элементарных частиц и квантовой оптике.

Читатель, знакомый с основами физики элементарных частиц, с удовольствием обнаружит ряд аналогий между элементарными возбуждениями в твердом теле и представлениями физики элементарных частиц. Также и физик-ядерщик припомнит, что, скажем, энергетические щели, имеющиеся у некоторых атомных ядер, были впервые обнаружены в сверхпроводимости.

При изложении мы постоянно старались обнажить существенные черты и избавиться от всего ненужного балласта. Так, например, квантование колебаний решетки обстоятельно мы рассматриваем только в одном измерении, поскольку уже здесь можно обнаружить все основные черты этого метода. В начальных параграфах специально приложен целый ряд заданий. Если читатель выполнит то или иное задание, то освоение соответствующего раздела, без сомнения, будет облегчено.

При составлении этой книги, и в особенности заданий к ней, я опирался на мою более чем десятилетнюю лекционную деятельность в университете Штуттгарта. Мне доставляет удовольствие, пользуясь этим удобным случаем, поблагодарить моих штуттгартских коллег, в особенности гг. Вагнера и Вайдлиха из отдела теоретической физики, за чрезвычайно приятную и дружественную рабочую атмосферу. На заключительном этапе предлагаемой книги мне, при написании ряда глав, в особенности об экситонах, пригодились мои лекции, прочитанные по приглашению в университете Страсбурга. Я сердечно благодарю профессора С. Никитина (S. Nikitine) за чрезвычайно увлекательные дискуссии.

Я очень обязан научному сотруднику А. Шенгле за содействие. Он не только тщательно и критически проверил все решения, но и, сверх того, сделал ряд ценных предложений по их улучшению. Особенно я благодарен моей секретарше ффрау Функе, которая не только отлично подготовила рукопись и рисунки, но и своим неутомимым участием постоянно побуждала меня к доведению работы над этой книгой до конца.

Штуттгарт, весна 1972 г.

Х. Хакен

Для облегчения чтения этой книги мы приводим некоторые указания.

1. Формулы, которые представляют собой важные промежуточные или конечные результаты, отмечены чертой.

2. Самый простой и, безусловно, эффективный способ изучить эту книгу — систематически следовать изложению.

Для читателей, которые хотят получить только общее впечатление или которых интересует какая-либо специальная проблема, мы даем краткий обзор внутренней связи отдельных глав.

Основы, которые должен усвоить каждый читатель, изложены в §§ 3, 4, 7—13 и 17—19. Те, кто интересуется только многоэлектронной проблемой (метод Хартри — Фока, электронные дырки, экситоны, электронные волны поляризации, плазмоны, магноны), могут сразу перейти к чтению §§ 20—28, причем для чтения § 27 следует познакомиться еще с § 16. Напротив, те читатели, которых интересует взаимодействие между электронами и колебаниями решетки (электрическое сопротивление, поляроны и сверхпроводимость), могут полностью опустить главу о проблеме многих электронов, однако им следует изучить дополнительно §§ 5, 6 и 15, 16. Глава о сверхпроводимости предполагает чтение главы V о колебаниях решетки. Изучению § 43 должно предшествовать чтение § 14. При чтении главы VI целесообразно прочитать все предшествующие главы, в то время как при чтении главы VIII можно обойтись основными сведениями с добавлением §§ 15, 16 и 24, 25.

Основы: §§ 3—4, 7—13, 17—19.

Многоэлектронная проблема: §§ 20—26, 28. *Предпосылка:* Основы.

§ 27: *предпосылка:* Основы и § 16.

Взаимодействие между электронами и колебаниями решетки: §§ 29—36. *Предпосылка:* Основы и §§ 5, 6 и 15, 16.

Функции Грина (§§ 37—39): *предпосылка:* все предыдущие параграфы.

Сверхпроводимость: §§ 40—42. *Предпосылка:* взаимодействие с колебаниями решетки и § 4.

§ 43: дополнительная *предпосылка:* § 14.

Взаимодействие электронов с квантованным излучением: *предпосылка:* Основы и §§ 15, 16 и 24, 25.

§ 1. Введение и обзор

При теоретическом обсуждении физических свойств твердых тел возможны в принципе два различных подхода: микроскопическая теория или макроскопические феноменологические модели. Как мы знаем, твердое тело, под которым мы в последующем изложении постоянно будем понимать кристалл, образовано регулярным расположением очень большого числа (около 10^{23} на см^{-3}) одинаковых атомов. Если бы мы захотели рассмотреть соответствующую проблему многих тел для электронов и атомных ядер, мы должны были бы решить уравнение Шредингера примерно для 10^{24} или более частиц. Очевидно, что это было бы абсолютно безнадежной затеей. Поэтому лучше опереться на имеющиеся экспериментальные зависимости и развитые для них модельные представления.

Задача теоретического квантовополевого рассмотрения состоит, таким образом, в том, чтобы перебросить мост между атомистическим представлением и модельными представлениями, согласно которым кристалл рассматривается как более или менее непрерывное тело. При этом оказывается, что наряду с основным состоянием кристалла существуют возбужденные состояния, которые допускают довольно простое описание.

Рассмотрим в качестве примера звуковые волны, которые в континуальной теории рассматриваются как периодические в пространстве и времени изменения плотности $\Delta\rho(x, t)$. Ради простоты рассмотрим стоячую волну, для которой $\Delta\rho$

можно представить в виде произведения $\Delta\rho(x) = A \sin \omega t \sin kx$ (рис. 1). Уже в этой модели содержатся исходные предпосылки для квантования. Поскольку временной множитель чисто гармонический, можно полагать, что соответствующая амплитуда колебания $q(t) = A \sin \omega t$ удовлетворяет уравнению гармонического осциллятора, квантование которого хорошо известно. Тогда для каж-

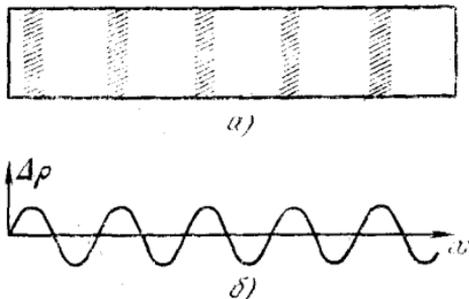


Рис. 1. Звуковые волны в среде: а) области повышенной плотности заштрихованы; б) зависимость $\Delta\rho$ от координаты x в фиксированный момент времени.

дой отдельной волны k мы получаем термы энергии $E_n = n \hbar \omega$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), которые являются целыми кратными $\hbar \omega$. Эти термы энергии следует трактовать в том смысле, что звуковой волне соответствует квант энергии $\hbar \omega$, т. е. *фонон*. Несколько слов об образовании подобных слов. Слог «фон» греческого происхождения и означает «звук», второй слог «он» означает «частица»^{*}). Следовательно, речь идет о квантах звука. Перед нами типичный пример квантования поля. При квантовании волне приписывается характер частицы, свойства которой определяются нижеследующими основными соотношениями:

$$\begin{aligned} \text{энергия } E &= \hbar \omega_k, \\ \text{импульс } p &= \hbar k. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Связь между частотой ω_k и волновым вектором k определяется с помощью вводимого уже в классической физике соотношения, называемого законом дисперсии, например такого: $\omega = vk$, где v — скорость звука. При рассмотрении в рамках квантовой теории поля решающим является корпускулярно-волновой дуализм,

знакомый нам из квантовой механики: колебательный процесс следует рассматривать в одном случае как волну, в другом — как процесс, происходящий с участием частиц.

Наряду с колебаниями плотности в изоляторе встречаются еще и другие колебания. Если кристалл состоит из положительных и отрицательных ионов, то пары положительных и отрицательных ионов при определенных обстоятельствах могут быть объединены в диполи. Если центры тяжести

отдельных атомов испытывают периодические смещения вблизи положения равновесия, то возникают и колебания диполей, которые макроскопически проявляются как поляризационные колебания. Если диполи связаны друг с другом, то поляризационные колебания распространяются в кристалле в виде продольных или поперечных волн (рис. 2). При этом поперечные поляри-

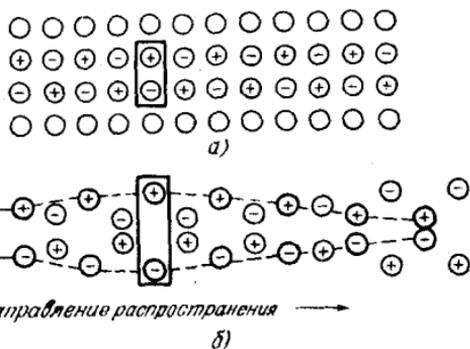


Рис. 2. Волны поляризации решетки в полярном кристалле: а) кристалл в отсутствие колебаний (положительно и отрицательно заряженные ионы расположены регулярно; в рамке находится некоторый выделенный диполь); б) поперечная волна поляризации.

^{*}) Неточно. Название элементарных возбуждений (как и большинства элементарных частиц) образовано по аналогии с термином «электрон» (от греч. *ēlectron* — янтарь), введенным Дж. Стони. (Прим. перев.)

зационные колебания можно возбудить с помощью света. Эти поляризационные колебания также могут быть проквантованы согласно закону (1.1).

Поляризация кристалла может быть вызвана не только поляризацией ионов, но также смещением электронных оболочек атомов относительно положительного заряда ядра. Если не обращаться к модели упруго связанных электронов, то на первый взгляд кажется непонятным, почему электронные оболочки также испытывают гармонические колебания, которые служат причиной появления продольных или поперечных поляризационных волн. Именно это мы покажем в последующем изложении.

Наряду с этими последними поляризационными колебаниями, для которых дипольный момент может быть порядка величины произведения заряда электрона на диаметр атома, в кристалле возникают также гигантские дипольные моменты, при которых электрон может быть удален от положительно заряженного ядра очень далеко. Тогда

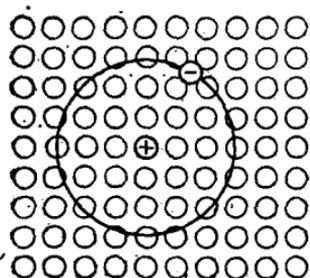


Рис. 3. Экситон в кристалле из нейтральных атомов. Из одного атома удален электрон, который затем начинает обращаться вокруг положительно заряженного атома по водородоподобной орбите. «Дырка», вообще говоря, тоже может перемещаться по кристаллу.

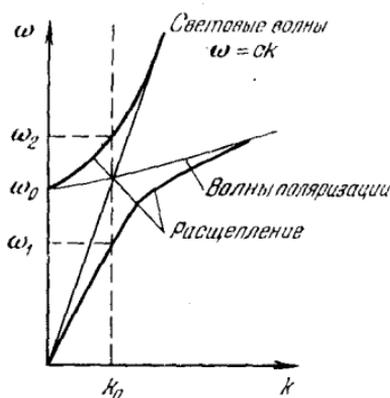


Рис. 4. Поляритон. Тонкие линии относятся к случаю отсутствия взаимодействия и представляют дисперсионные кривые для волн излучения и волн поляризации (c — скорость света). Жирные линии описывают закон дисперсии в присутствии взаимодействия. В резонансной точке, определяемой условиями $k_{св} = k_{пол} = k_0$; $\omega_{св} = \omega_{пол} = \omega_0$, частота ω_0 расщепляется на две новые частоты ω_1 и ω_2 . Это расщепление продолжается и в области больших и малых значений k .

следует считать, что электронный заряд обращается вокруг положительно заряженной «дырки» по водородоподобной орбите очень большого радиуса (рис. 3). Возникающее в этом случае возбуждение называется *экситоном*.

Рассматривая взаимодействие между светом и волнами поляризации, мы приходим к другому элементарному возбуждению. Поскольку обе системы колеблются гармонически, между ними,

как между двумя связанными маятниками, можно ввести взаимодействие. Тогда, точно так же как и в случае связанных маятников, возникает новый вид колебания (в нашем случае совместное распространение света и электронных поляризационных волн), причем появляется и новый закон дисперсии (рис. 4). Если проквантовать эти новые колебания, то мы получим так называемые *поляритоны*.

Другой пример элементарных возбуждений мы получим, если примем во внимание спины электронов, отчетливо проявляющиеся в ферромагнетике благодаря создаваемому ими магнитному полю.

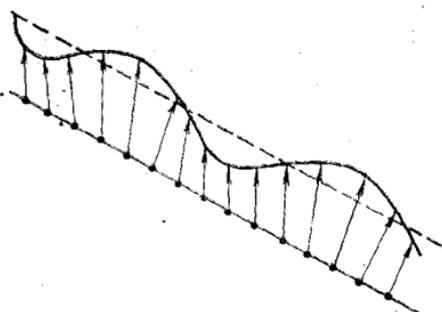


Рис. 5. Спиновая волна в ферромагнетике.

При абсолютной температуре $T = 0$ все спины в ферромагнетике направлены параллельно. Выстроенные таким образом спины могут быть отклонены, например, с помощью электромагнитного поля. Эти отклонения затем распространяются по кристаллу в виде спиновой волны (рис. 5). Квантуя эту волну, мы получаем так называемые *магноны*.

До сих пор молчаливо предполагалось, что электроны в кристалле не слишком подвижны. Металлическую проводимость, напротив, можно понять, только допустив, что электроны ведут себя практически как свободные частицы. Простейшее представление состоит в предположении, что электроны образуют газ невзаимодействующих частиц. Согласно квантовой теории частице, не обладающей силовым полем, соответствует плоская волна с волновым вектором \mathbf{k} и импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Поскольку значения \mathbf{k} в конечном кристалле лежат очень плотно, но тем не менее *дискретно* (граничные условия для электронных волн выполняются только для определенных длин волн $\lambda = 2\pi/k$), то электроны заполняют отдельные состояния с определенными значениями \mathbf{k} . При этом следует учитывать принцип Паули, согласно которому каждое такое \mathbf{k} -состояние может быть занято только двумя электронами с противоположно направленными спинами. Если занятые состояния изобразить в \mathbf{k} -пространстве, то получится так называемая сфера Ферми, поверхность которой при абсолютном нуле температур $T = 0$ называется уровнем Ферми (рис. 6). Внутренность сферы Ферми иногда называют фермиморем. Задача теоретического квантовополевого рассмотрения состоит в том, чтобы объяснить, почему электроны и при взаимодействии друг с другом и с неподвижно закрепленными в узлах решетки ионами ведут себя практически как свободные частицы.

На примере *конечной* электрической проводимости мы осознаем, с другой стороны, что введение одних «элементарных возбуждений» не достаточно, чтобы понять физические свойства твердых тел. Ведь обладающие свободной подвижностью электроны вызывали бы бесконечную проводимость. В действительности, однако, движение электронов благодаря постоянным колебаниям решетки нарушается, причем электроны выбиваются со своих траекторий, отчего и возникает конечное электрическое сопротивление (рис. 7). Этот пример ясно указывает на то, что важной задачей полевого рассмотрения является именно исследование взаимодействий элементарных возбуждений друг с другом. Существование подобных взаимодействий ведет к рассеянию из начального состояния и тем самым к конечному времени жизни начального состояния. Аналогичным образом, из-за взаимодействия звуковых волн друг с другом возникает тепловое сопротивление.

Наряду с этим довольно очевидным следствием взаимодействия существует другое, менее очевидное, но весьма типичное для квантовополевого рассмотрения. А именно, возникают не только те процессы, при которых частицы рассеиваются друг на друге

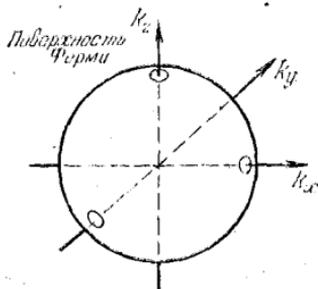


Рис. 6. Ферми-сфера. Каждая точка в « k -пространстве» обозначает состояние, которое может быть занято не более чем двумя электронами с противоположными спинами. В состоянии с наименьшей полной энергией занятые k -состояния образуют сферу Ферми.



Рис. 7. Электрическое сопротивление в решетке без дефектов возникает благодаря «соударениям» электронов (прямые линии) с квантами звука (волнистая линия). На этом рисунке показан процесс поглощения кванта звука.

или рождаются и уничтожаются кванты, но также и такие, при которых начальное и конечное состояния полностью идентичны. Тем не менее взаимодействие, например между электроном и полем звуковой волны, приводит к совершенно новым явлениям. Оказывается, что масса электрона благодаря взаимодействию с полем звуковой волны изменяется (возникает *полярон*; рис. 8) и, кроме того, взаимодействие между электроном и полем зву-

ковой волны приводит к возникновению силы *притяжения* между электронами.

Этот эффект, который в физике твердого тела был установлен вначале для экситонов, позднее оказался решающим для теории сверхпроводимости. При определенных условиях это взаимодействие может привести к образованию электронной пары. Благодаря этому между основным состоянием и возбужденными состояниями возникает щель, в результате чего электронное состояние сверхпроводника в целом получает определенную устойчивость по отношению к внешним возмущениям. Это и приводит к объяснению бесконечно высокой проводимости и диамагнетизма сверхпроводников. Возмущения, связанные с флуктуациями колебаний решетки, оказываются, так сказать, выключенными.

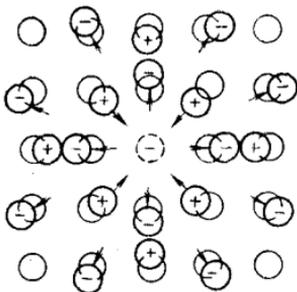


Рис. 8. Полярон. Электрон (штриховой кружок в центре) смещает ионы полярного кристалла из положений равновесия. В результате этого изменяется эффективная масса электрона.

В заключение обсудим еще одно элементарное возбуждение. Предположим, что существует местное нарушение плотности свободно движущихся электронов относительно «фона» положительных ионов, так что локальное распределение зарядов в кристалле более не является электронейтральным. При этом возникают возвращающие поля, которые стремятся вернуть электроны в их первоначальное положение (рис. 9). Поскольку электроны обладают инертной массой, они проскакивают свои положения равновесия и создают новое неоднородное распределение зарядов, а вместе с ним и возвращающие поля. Интуитивно ясно, что плотность электронного заряда будет совершать колебание, так называемое плазменное колебание. Квантование этого колебания ведет к *плазмонам*.

При квантовополевом рассмотрении, как можно заключить из сказанного, необходимо иметь по возможности ясное физическое представление об отдельных возможных элементарных возбуждениях. Задача квантовополевой теории состоит в том, чтобы на основе фундаментального уравнения Шредингера теоретически сконструировать эти элементарные возбуждения и изучить их взаимодействия. Мы уверены в том, что здесь имеется широкое поле для будущих исследований элементарных возбуждений нового типа, например, при переходе от рассмотрения простых

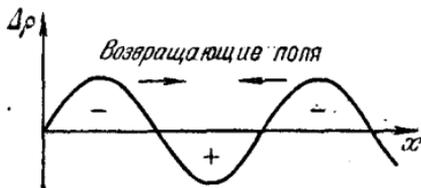


Рис. 9. Плазмоны — это кванты колебаний плазмы. Эти колебания возникают благодаря возвращающей силе электрических полей.

кристаллов к сложным молекулярным кристаллам. Вообще же применение методов квантовой теории поля не ограничивается только кристаллами, они могут быть также использованы для изучения свойств аморфных тел.

§ 2. Некоторые основные понятия классической механики

Квантование полей никоим образом не распространяется только лишь на механические системы, скажем колебания решетки, оно охватывает и совершенно другие системы, например электромагнитное поле. Тем не менее при квантовании поля обычно исходят из формализма классической механики. При этом речь идет об уравнениях Лагранжа и Гамильтона¹⁾.

Вначале мы поясним, как это делается, на примере одной частицы, которая движется в одном измерении. Соответствующую координату мы обозначим через q . Уравнение движения Ньютона гласит: масса \times ускорение = силе:

$$m\ddot{q} = K(q). \quad (2.1)$$

В данной книге почти всегда считается, что сила обладает потенциалом $V(q)$, т. е. может быть представлена в виде

$$K(q) = -\frac{\partial V}{\partial q}. \quad (2.2)$$

Кинетическую энергию мы обозначим буквой T :

$$T = \frac{m}{2} \dot{q}^2. \quad (2.3)$$

Используя эти обозначения, введем *функцию Лагранжа*, которая равна разности кинетической и потенциальной энергии:

$$L(\dot{q}, q) = T - V. \quad (2.4)$$

С помощью функции Лагранжа (2.4) уравнение движения (2.1) формально можно переписать в совершенно ином виде, что вначале может показаться усложнением, однако позже, при квантовании поля, даст заметные преимущества. Это уравнение Лагранжа гласит:

$$\left| \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0. \quad (2.5) \right.$$

Если выполнить дифференцирование L по \dot{q} и q , то при учете (2.3) и (2.2) получаем

$$\frac{d}{dt} m\dot{q} - K(q) = 0, \quad (2.6)$$

¹⁾ Читатель, знакомый с этим формализмом, может пропустить этот параграф и начать читать следующий.

что после выполнения дифференцирования по времени дает первоначальное уравнение (2.1).

Наряду с функцией Лагранжа важную роль играет *функция Гамильтона*. Эта функция равна сумме кинетической и потенциальной энергии:

$$| \quad H = T + V(q). \quad (2.7)$$

В действительности функцию H рассматривают не как функцию q и \dot{q} , а вместо \dot{q} в качестве новой переменной вводят импульс p . В рассматриваемом здесь одномерном случае эта зависимость дается выражением

$$p = m\dot{q}. \quad (2.8)$$

При этом кинетическая энергия принимает вид

$$T = \frac{1}{2m} p^2. \quad (2.9)$$

По причинам, которые станут более ясными позднее, связь (2.8) удобно переписать в другом, несколько более формальном виде. А именно, непосредственно видно, что (2.8) можно получить также из

$$\left| \quad p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \left(\equiv \frac{\partial T}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial V}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}} \right). \quad (2.10)$$

Это позволяет, далее, ввести связь между H и L , которую в данном случае можно сразу проверить прямой подстановкой соотношений (2.8) и (2.4):

$$| \quad H = pq - L. \quad (2.11)$$

Исходное уравнение движения (2.1) можно представить с помощью функции Гамильтона в виде так называемых уравнений Гамильтона. Для этого мы запишем два уравнения, а именно, одно для q , согласно (2.8), и второе для временного изменения импульса p под действием силы $K(q)$, которую заменим ее выражением через потенциал (2.2). Тогда вместо (2.1) мы выпишем два уравнения:

$$\dot{q} = \frac{p}{m}, \quad (2.12)$$

$$\dot{p} = - \frac{\partial V}{\partial q}. \quad (2.13)$$

Правые части этих уравнений с помощью производных функции Гамильтона по p и q можно представить в весьма симметричном

виде

$$\left\{ \begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \left(\equiv \frac{\partial T}{\partial p} + \frac{\partial V}{\partial p} = \frac{\partial T}{\partial p} \right), \\ \dot{p} &= - \frac{\partial H}{\partial q} \left(\equiv - \frac{\partial T}{\partial q} - \frac{\partial V}{\partial q} = - \frac{\partial V}{\partial q} \right). \end{aligned} \right. \quad (2.14)$$

Читателю должно быть, естественно, совершенно ясно, что эти новые формулировки физически полностью эквивалентны первоначальной формулировке с помощью уравнения движения Ньютона (2.1). Хотя эти формулировки тому или иному читателю могут показаться непривычными и на первый взгляд даже сложными, они являются, как мы вскоре увидим, исходным пунктом для квантования полей. В действительности при этом необходимо рассмотреть не одну частицу, а целый набор частиц. Ради простоты мы рассмотрим далее вновь одномерное движение, однако все рассмотрение можно перенести и на случай трехмерного движения. Уравнения движения Ньютона для частиц, которые мы будем различать индексом j , принимают вид

$$m_j \ddot{q}_j = K_j(q_1, \dots, q_N). \quad (2.15)$$

В последующем изложении для набора координат мы будем использовать сокращенное обозначение

$$(q_1, \dots, q_N) = \{q\} = \{q_j\}, \quad (2.16)$$

так что (2.15) переписывается в виде

$$m_j \ddot{q}_j = K_j(\{q\}). \quad (2.17)$$

Далее, предположим вновь, что существует потенциал, из которого все силы получаются просто дифференцированием:

$$K_j = - \frac{\partial V}{\partial q_j}. \quad (2.18)$$

Определим, как обычно, кинетическую энергию в виде

$$T = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} m_j \dot{q}_j^2 \quad (2.19)$$

так что функция Лагранжа имеет вид

$$L = T - V \quad (2.20)$$

и соответствующие уравнения Лагранжа

$$\left| \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0. \right. \quad (2.21)$$

Подставляя (2.20) в (2.21) совместно с определениями (2.18) и

(2.19), тотчас же убеждаемся, что из (2.21) можно непосредственно вновь прийти к (2.15). Импульсы

$$p_j = m_j \dot{q}_j \quad (2.22)$$

формально можно вновь получить из

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}. \quad (2.23)$$

Связь между функциями Гамильтона и Лагранжа сразу получается как обобщение (2.11):

$$H = \sum_j p_j \dot{q}_j - L. \quad (2.24)$$

Если сюда подставить (2.22) и определение (2.20), то выражение для H принимает вид

$$\left| H = \sum_j \frac{1}{2m_j} p_j^2 + V, \quad (2.25) \right.$$

который мы будем в дальнейшем чаще всего использовать в качестве исходного пункта теории. Аналогично и уравнения Гамильтона сразу можно обобщить на случай многих частиц. Для этого выразим формально уравнения

$$\dot{q}_j = \frac{p_j}{m_j} \quad (2.26)$$

и

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial V}{\partial q_j} \quad (2.27)$$

следующим образом через функцию Гамильтона:

$$\left| \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}. \quad (2.28) \right.$$

Если исключить из уравнений (2.26) и (2.27) p_j , продифференцировать первое уравнение по времени, а во втором уравнении выразить \dot{p} через \dot{q} , то мы вновь возвращаемся к уравнению (2.15), причем сила определяется выражением (2.18).

Задания к § 2

1. Почему $\frac{\partial T}{\partial q} = 0$, $\frac{\partial V}{\partial \dot{q}} = 0$, $\frac{\partial V}{\partial p} = 0$?

2. Для упругой силы $K(q) = -fq$ (f — константа упругой связи). Каков явный вид функций Гамильтона и Лагранжа (2.4), (2.7) и уравнений движения (2.14)?

§ 3. Квантовомеханический осциллятор: операторы рождения и уничтожения

Теперь мы займемся исследованием движения частицы с массой m , упруго связанной относительно положения равновесия. В качестве координаты q частицы выбираем отклонение из положения равновесия (рис. 10, 11), а соответствующий импульс



Рис. 10. Гармонический осциллятор: а) пример из механики; б) потенциальная энергия как функция отклонения.

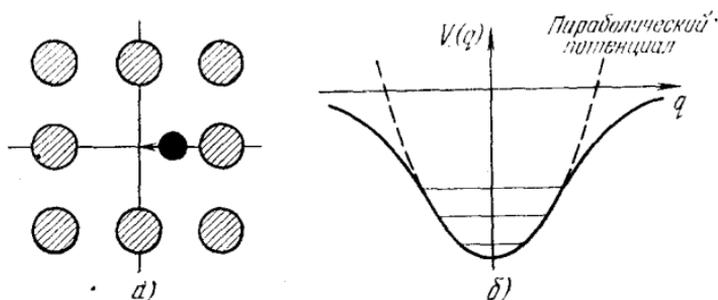


Рис. 11. Пример применения гармонического осциллятора. В покоящейся атомной решетке отсутствует один тяжелый атом, который заменен легким (черный кружок). а) Расположение атомов. б) Реальный потенциал приближенно описывается параболой. Низколежащие колебательные состояния практически «не замечают» отклонений от точного хода кривой потенциальной энергии; q — координата легкого атома.

обозначим p . Константу упругой связи f мы исключаем при помощи известного из классической физики соотношения $f = m\omega^2$, где ω — частота осциллятора. В этих обозначениях кинетическая

энергия имеет вид $T = p^2/(2m)$, а потенциальная энергия равна $V = (m/2)\omega^2 q^2$.

Классическая функция Гамильтона, следовательно, дается выражением

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2. \quad (3.1)$$

Переход к квантовой механике осуществляется с помощью замены импульса p на оператор согласно правилу

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq}. \quad (3.2)$$

Операторы p и q удовлетворяют перестановочному соотношению

$$pq - qp = \frac{\hbar}{i}. \quad (3.3)$$

Это соотношение следует понимать в том смысле, что мы считаем обе части (3.3) действующими на некоторую волновую функцию ψ , используя явное представление (3.2) оператора p :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} (q\psi) - q \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} \psi \right) = \frac{\hbar}{i} \psi. \quad (3.4)$$

Если продифференцировать первый член в (3.4) по правилу дифференцирования произведения, мы получим

$$(\hbar/i)\psi + (\hbar/i)q \cdot (d/dq)\psi.$$

Выделяя в этом выражении второй член, который взаимно уничтожается со вторым членом в (3.4), мы получаем, естественно, сразу правую сторону (3.4). Поскольку (3.4) справедливо для любой дифференцируемой функции, мы можем считать (3.3) тождеством.

Хотя обоснование (3.3) может показаться тривиальным, перестановочные соотношения такого рода имеют основополагающее значение для всей квантовой теории поля. Мы действительно увидим, что многие проблемы физики твердого тела и квантовой оптики (а также и других областей) могут быть сформулированы с помощью квантовой теории поля и решены при умелом применении перестановочных соотношений. Однако вернемся вначале назад к гармоническому осциллятору. Если подставить (3.2) в (3.1), мы получим оператор Гамильтона гармонического осциллятора. Тогда уравнение Шредингера принимает вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2 \right\} \psi(q) = E\psi(q). \quad (3.5)$$

Для дальнейшего обсуждения (3.5) введем безразмерную координату ξ с помощью соотношения

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi, \quad (3.6)$$

после чего уравнение Шредингера (3.5) принимает вид

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right\} \psi(\xi) = E\psi(\xi). \quad (3.7)$$

Если бы с операторами ξ и $d/d\xi$ можно было обращаться как с обычными числами, было бы очевидно, что стоящий слева в (3.7) оператор

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \quad (3.8)$$

можно рассматривать как выражение

$$(-\alpha^2 + \beta^2) \quad (3.9)$$

и соответственно этому провести разложение вида

$$(-\alpha + \beta)(\alpha + \beta). \quad (3.10)$$

Попытаемся вместо левой части (3.7) подставить выражение

$$\hbar\omega \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \psi. \quad (3.11)$$

Если мы перемножим скобки (при этом следует учесть точный порядок следования операторов $\xi, d/d\xi$), то мы получим

$$(3.11) = \underbrace{\frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right\}}_I \psi(\xi) - \underbrace{\frac{\hbar\omega}{2} \left\{ \frac{d}{d\xi} \xi - \xi \frac{d}{d\xi} \right\}}_{II} \psi(\xi).$$

Первое выражение, как мы и хотели, совпадает с левой стороной (3.7). Второе с учетом перестановочного соотношения

$$\frac{d}{d\xi} \xi - \xi \frac{d}{d\xi} = 1 \quad (3.12)$$

переходит в выражение

$$II = -\frac{\hbar\omega}{2} \psi. \quad (3.13)$$

(Перестановочное соотношение (3.12) сразу получается из приведенного выше соотношения (3.3), в котором мы заменяем q на ξ согласно (3.6).)

Стоящие в (3.11) выражения в скобках также представляют собой некоторые операторы, которые мы вначале чисто формально обозначим кратко следующим образом:

$$\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) = b^+ \right. \quad (3.14)$$

$$\left. \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) = b. \quad (3.15) \right.$$

Поскольку (3.11) и левая часть (3.7) отличаются лишь дополнительным членом (3.13), мы введем смещенную энергию

$$E' = E - \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (3.16)$$

Тогда уравнение Шредингера (3.7) окончательно принимает следующий вид:

$$\left| \hbar\omega b^+ b \psi = E' \psi. \quad (3.17) \right.$$

Для того чтобы вывести перестановочные соотношения для операторов b и b^+ , составим выражение $bb^+ - b^+b$ и заменим в нем операторы согласно (3.14) и (3.15). Применяя затем (3.12), мы непосредственно получаем основополагающее перестановочное соотношение

$$\left| bb^+ - b^+b = 1. \quad (3.18) \right.$$

Операторы, удовлетворяющие соотношению (3.18), мы назовем, по соображениям, которые будут ясны позже, *бозе-операторами*.

Покажем теперь, как с помощью операторов b^+ и b и перестановочного соотношения (3.18) простым образом можно сконструировать собственные состояния гармонического осциллятора. Для этого будем исходить из того, что энергия квантовомеханического осциллятора всегда положительна (см. задание 1) и всегда, следовательно, ограничена снизу. Обозначим соответствующее наименьшему значению энергии E'_0 состояние через ψ_0 .

Умножим уравнение

$$\hbar\omega b^+ b \psi_0 = E'_0 \psi_0 \quad (3.19)$$

слева на оператор b , что дает

$$\hbar\omega (bb^+ b) \psi_0 = E'_0 b \psi_0. \quad (3.20)$$

Применяя перестановочное соотношение (3.18), перенесем в левой части (3.20) первый оператор b направо, тогда получим

$$\hbar b \{1 + b^+ b\} b \psi_0 = E'_0 b \psi_0. \quad (3.21)$$

1) b^+ читается «б-крест».

Перенесем, наконец, $\hbar\omega b\psi_0$ в правую часть, после чего находим

$$\hbar\omega b^+b(b\psi_0) = (E'_0 - \hbar\omega) b\psi_0. \quad (3.22)$$

Это уравнение, однако, означает, что $b\psi_0$ является новой собственной функцией с собственным значением $E'_0 - \hbar\omega$, в противоположность нашему предположению, что ψ_0 — наименьшее состояние. Это противоречие разрешается, если положить

$$b\psi_0 = 0. \quad (3.23)$$

Именно это уравнение и служит в последующем изложении определением основного состояния ψ_0 . Чтобы увидеть это по возможности отчетливо и установить связь с известными волновыми функциями осциллятора, вернемся на момент к операторам ξ и $d/d\xi$ согласно (3.14) и (3.15). Тогда (3.23) переходит в дифференциальное уравнение первого порядка

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\psi_0(\xi) = 0, \quad (3.24)$$

которое, очевидно, имеет решение вида

$$\psi_0(\xi) = Ce^{-\xi^2/2}. \quad (3.25)$$

Это решение, естественно, есть волновая функция основного состояния осциллятора. Теперь мы хотим провести решение уравнения (3.17), для чего нам дифференциальные уравнения больше не понадобятся. Мы найдем волновые функции и значения энергии чисто алгебраически. Для этого умножим уравнение (3.17) слева на b^+ :

$$b^+(\hbar\omega b^+b)\psi = E'b^+\psi. \quad (3.26)$$

С помощью перестановочного соотношения (3.18) и проведенного ранее преобразования мы затем получаем

$$\hbar\omega b^+b(b^+\psi) = (E' + \hbar\omega)b^+\psi. \quad (3.27)$$

Отсюда очевидно, что если ψ — собственная функция, то $b^+\psi$ также является собственной функцией, соответствующей большему на $\hbar\omega$ собственному значению. Действуя n раз оператором b^+ , получаем собственную функцию n -го возбужденного состояния

$$\psi_n = (b^+)^n\psi_0. \quad (3.28)$$

Поскольку уравнение (3.17) однородно относительно ψ , то собственная функция, как обычно, определяется с точностью до неопределенного постоянного множителя. Мы выберем этот множитель таким образом, чтобы ψ_n была нормирована. Здесь и в последующем изложении мы выбираем нормировку в *безразмерной*

координате ξ следующим образом:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(\xi) \psi_n(\xi) d\xi = 1.$$

Нормировочный множитель, как мы покажем ниже (см. (4.21)), можно определить чисто алгебраически. Здесь мы заранее используем этот результат и запишем нормированную собственную волновую функцию в виде

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \psi_0. \quad (3.29)$$

Каков явный вид соответствующих собственных значений? Чтобы получить те собственные значения, которые соответствуют $n=0$, умножим (3.23) на b^+ и сравним результат с основным уравнением (3.17).

Очевидно, что $E'_0 = 0$.

Поскольку при последовательном n -кратном действии оператора b^+ на ψ_0 энергия E'_0 увеличивается каждый раз на $\hbar\omega$, то собственное значение (3.29) есть

$$E' = n\hbar\omega, \quad (3.30)$$

или, в первоначальной энергетической шкале уравнения (3.5),

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (3.31)$$

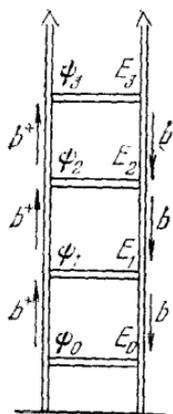


Рис. 12. Операторы рождения и уничтожения вызывают подъем или спуск по лестнице состояний.

Следовательно, (3.30) можно интерпретировать как наличие в n -м состоянии n квантов энергии, каждый из которых равен $\hbar\omega$. Поскольку при действии оператора b^+ на ψ_n число квантов увеличивается на один, т. е. рождается один добавочный квант, то оператор b^+ называется оператором рождения. Поскольку при действии оператора b на ψ (см. (3.20—3.22)) один квант уничтожается, то оператор b называют оператором уничтожения (рис. 12).

Большое число несвязанных осцилляторов. Теперь мы перенесем результаты, полученные для одного осциллятора, на случай большого числа осцилляторов. Для этого предположим, что отдельные осцилляторы, координаты q которых мы будем различать индексом k , колеблются независимо друг от друга. Массы и частоты осцилляторов могут быть разными и будут соответственно также обозначаться индексом k . Классическая функция Гамильтона этой системы равна просто сумме по всем функциям Га-

мильтона отдельных осцилляторов:

$$H = \sum_k H_k, \quad (3.32)$$

где

$$H_k = \frac{1}{2m_k} p_k^2 + \frac{m_k}{2} \omega_k^2 q_k^2. \quad (3.33)$$

Для перехода к квантованию следует воспользоваться правилом замены

$$p_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k}. \quad (3.34)$$

Выполняя для каждого отдельного осциллятора все проведенные выше преобразования, получим оператор Гамильтона для несвязанных осцилляторов следующего вида:

$$H = \sum_k \hbar \omega_k (b_k^+ b_k + 1/2). \quad (3.35)$$

Сумму $\sum_k (1/2) \hbar \omega_k$ мы назовем *нулевой энергией*. Поскольку она является константой, то в последующем мы будем считать, что нуль энергетической шкалы сдвинут, так что нулевая энергия $\sum_k (1/2) \hbar \omega_k$ в (3.35) может быть опущена. Уравнение Шредингера тогда имеет вид

$$\{\hbar \omega_1 b_1^+ b_1 + \hbar \omega_2 b_2^+ b_2 + \dots + \hbar \omega_N b_N^+ b_N\} \Phi = E \Phi. \quad (3.36)$$

Здесь вновь имеют важное значение перестановочные соотношения. Естественно, мы имеем

$$b_k b_k^+ - b_k^+ b_k = 1. \quad (3.37)$$

Наряду с этим перестановочным соотношением мы должны еще указать, каким перестановочным соотношениям удовлетворяют операторы b_k и т. д. с различными индексами k и k' . Поскольку операторы b_k и b_k^+ состоят из q_k и $\partial/\partial q_k$ (см. (3.14) и (3.15)) и $\partial/\partial q_k$ коммутирует соответственно с $q_{k'}$ ($k \neq k'$), мы сразу получаем

$$b_k b_{k'}^+ - b_{k'}^+ b_k = 0 \quad \text{для } k \neq k'. \quad (3.38)$$

С помощью символа Кронекера

$$\delta_{kk'} = \begin{cases} 1 & \text{для } k = k', \\ 0 & \text{для } k \neq k' \end{cases} \quad (3.39)$$

(3.37) и (3.38) можно объединить:

$$\left| \begin{array}{l} b_k b_{k'}^+ - b_{k'}^+ b_k = \delta_{kk'}. \end{array} \right. \quad (3.40)$$

Таким же простым образом можно получить следующие перестановочные соотношения:

$$\left| \begin{array}{l} b_k b_{k'} - b_{k'} b_k = 0, \end{array} \right. \quad (3.41)$$

$$\left| \begin{array}{l} b_k^+ b_{k'}^+ - b_{k'}^+ b_k^+ = 0. \end{array} \right. \quad (3.42)$$

Это и есть *перестановочные соотношения для бозе-операторов*. В последующем изложении мы используем для комбинации двух операторов A и B (здесь, например, $A = b_k$, $B = b_{k'}$) сокращенное обозначение

$$AB - BA = [A, B],$$

которое называется «коммутатором операторов A и B ».

Теперь мы покажем, как с помощью перестановочных соотношений (3.40—3.42) можно сконструировать собственные состояния и найти собственные значения энергии. При этом будем считать, что Φ_0 является наимизшим состоянием. Соответствующую наимизшую энергию обозначим E_0 . Умножая теперь (3.36) на b_l и используя перестановочные соотношения (3.40) и (3.41), получаем

$$\{\hbar\omega_1 b_1^+ b_1 b_l + \hbar\omega_2 b_2^+ b_2 b_l + \dots + \hbar\omega_l (b_l^+ b_l + 1) b_l + \dots\} \Phi_0 = E_0 b_l \Phi_0. \quad (3.43)$$

Перенося $\hbar\omega_l b_l \Phi_0$ в правую часть уравнения, получаем

$$\{\hbar\omega_1 b_1^+ b_l + \dots + \hbar\omega_l b_l^+ b_l + \dots\} b_l \Phi_0 = (E_0 - \hbar\omega_l) b_l \Phi_0. \quad (3.44)$$

Отсюда следует, что $b_l \Phi_0$ является новой собственной функцией с еще меньшей собственной энергией, что находится в противоречии с предположением, что E_0 уже является наимизшей энергией. Следовательно, вновь должно быть

$$b_l \Phi_0 = 0. \quad (3.45)$$

Так как индекс l может быть любым, то (3.45) должно быть справедливым для всех $l = 1, \dots, N$. Одновременно отсюда следует, что $E_0 = 0$.

Мы можем теперь последовательным применением операторов b_j^+ точно так же, как для отдельного гармонического осциллятора, образовать общее *собственное состояние оператора Гамильтона* (3.35), которое принимает вид

$$\left| \begin{array}{l} \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_N!}} (b_1^+)^{n_1} \dots (b_N^+)^{n_N} \Phi_0, \end{array} \right. \quad (3.46)$$

где радикал отвечает за нормировку. Показатели n_j являются целыми числами ≥ 0 , причем по определению

$$0! = 1, \quad (b^+)^0 = 1.$$

Энергия, соответствующая состоянию (3.46), равна

$$| E = \hbar\omega_1 n_1 + \hbar\omega_2 n_2 + \dots + \hbar\omega_N n_N \quad (+ \text{ нулевая энергия}), \quad (3.47)$$

причем

$$\text{Нулевая энергия} = (1/2)\hbar(\omega_1 + \dots + \omega_N).$$

Выражение (3.46) можно переписать в краткой форме

$$\left| \Phi_{\{n_k\}} = \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (b_k^+)^{n_k} \Phi_0, \quad (3.48) \right.$$

и соответственно (3.47) принимает вид

$$E = \sum_k \hbar\omega_k n_k. \quad (3.49)$$

Эта запись имеет то преимущество, что мы можем использовать ее и тогда, когда k — не целые числа 1, 2, ..., а, например, векторы.

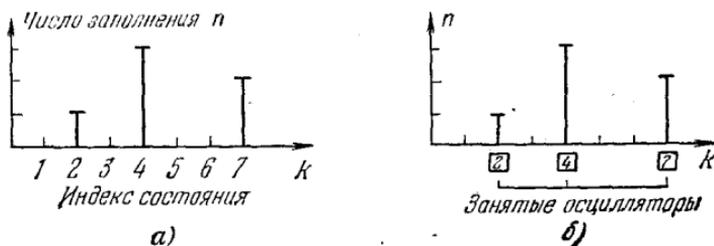


Рис. 13. Два различных способа описания состояний (см. текст).

Формально в представлении (3.46) или (3.48) для функции состояния присутствуют все n_k , даже если они равны нулю. На рис. 13, а приведен соответствующий пример. Здесь совокупность $\{n\}$ имеет следующий вид:

$$\{n\} = (0, 1, 0, 3, 0, 0, 2, 0).$$

Следовательно, возможно и другое представление, в котором следует учитывать только $n_k > 0$. В этом случае индексы осцилляторов связаны неравенствами $k_1 < k_2 < \dots < k_m$. В нашем примере

$k_1 = 2, k_2 = 4, k_3 = 7$ (рис. 13, б). В общем случае мы пишем

$$\Phi_{\{n\}} = \frac{1}{\sqrt{n_{k_1}! n_{k_2}! \dots n_{k_M}!}} (b_{k_1}^+)^{n_{k_1}} \dots (b_{k_M}^+)^{n_{k_M}} \Phi_0, \quad (3.50)$$

где все $n_{k_j} > 0$.

Задания к § 3

1. Показать, что энергия гармонического осциллятора всегда ≥ 0 .

Указание. Умножить обе стороны (3.7) на ψ^* и проинтегрировать по ξ . Член

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\xi^2} \psi d\xi$$

можно преобразовать с помощью интегрирования по частям.

2. На примере собственной функции наимизшего состояния

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \psi_0 \quad (n = 0, 1, 2, 3) \quad (A 3.1)$$

показать, что функции, определенные выражением (A 3.1), будучи представлены как функции аргумента ξ , принимают обычный вид волновых функций осциллятора:

$$\psi_n(\xi) = c_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi),$$

где c_n — константа нормировки, $H_n(\xi)$ — полином Эрмита n -го порядка.

Указание. Выразить ψ_0 согласно (3.25) и b^+ согласно (3.14) через ξ .

3. На гармонический осциллятор действует дополнительно внешняя зависящая от времени сила $K(t)$. Какой вид имеет зависящее от времени уравнение Шредингера в представлении операторов уничтожения и рождения b и b^+ ?

4. Показать, что общее решение зависящего от времени уравнения Шредингера $\hbar \omega b^+ b \psi = i \hbar \dot{\psi}$ имеет вид

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \psi_0 e^{-in\omega t},$$

где c_n — произвольные независящие от времени коэффициенты.

§ 4. Вычисление средних значений

В классической механике движение частиц описывается с помощью *измеряемых величин*, таких как координата, импульс, кинетическая энергия и т. д. Этим измеряемым величинам в кван-

товой механике сопоставляются операторы. Образую средние значения, мы можем затем сделать предсказания относительно измеряемых величин. Для одномерного движения это делается по приведенной в табл. 1 схеме. При вычислении средних значений в основу следует положить условие нормировки

$$\int \psi^*(q, t) \psi(q, t) dq = 1.$$

Пределы интегрирования от $-\infty$ до $+\infty$.

Таблица 1

	Механические величины	Операторы	Средние значения
Координата	$q(t)$	q	$\int \psi^*(q, t) q \psi(q, t) dq$
Импульс	$p(t)$	$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq}$	$\int \psi^*(q, t) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} \psi(q, t) dq$
Кинетическая энергия	$\frac{p^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2}$	$\int \psi^*(q, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} \right) \times$ $\times \psi(q, t) dq$
Потенциальная энергия	$\frac{m}{2} \omega^2 q^2$	$\frac{m}{2} \omega^2 q^2$	$\int \psi^*(q, t) \frac{m}{2} \omega^2 q^2 \psi(q, t) dq$
Полная энергия	$\frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{m}{2} \omega^2 q^2$	$\int \psi^*(q, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \right.$ $\left. + \frac{m}{2} \omega^2 q^2 \right) \psi(q, t) dq$

Вычисление средних значений с помощью b и b^+ . В предыдущих параграфах мы определили собственные функции и собственные значения только с помощью перестановочных соотношений (3.18), не пользуясь тем, что ψ является функцией q (или ξ). С другой стороны, средние значения, согласно приведенной выше табл. 1, определяются как интегралы по q . Следовательно, схема решения с помощью операторов b и b^+ будет полной, если мы найдем чисто алгебраический метод вычисления средних значений. Ради простоты мы сразу проведем вычисления в безразмерной координате ξ . Предположим, что основное состояние уже нормировано:

$$\int \psi_0^* \psi_0 d\xi = 1. \quad (4.1)$$

Приведенные в табл. 1 средние значения строятся с помощью операторов, имеющих следующую структуру:

они содержат либо

а) координату q или теперь уже безразмерную координату ξ и ее степени, либо

б) производные первого и более высоких порядков по ξ .

Вообще, можно представить себе оператор, который построен как из степеней ξ , так и из производных по ξ . Как координату ξ , так и производные $d/d\xi$ мы можем, согласно формулам (3.14) и (3.15), выразить через операторы b и b^+ и наоборот. Если мы подставим операторы b и b^+ в выражения вида

$$\xi, \xi^m, \frac{d}{d\xi}, \left(\frac{d}{d\xi}\right)^m, \dots, \quad (4.2)$$

то получим линейные комбинации выражений вида

$$b, b^+, b^2, b^{+2}, \dots, b^+b, \dots, (b^+)^m. \quad (4.3)$$

Вместо того чтобы вычислять средние значения с помощью выражений (4.2), теперь нам нужно вычислить средние значения с помощью операторов вида (4.3). Для этого мы воспользуемся некоторыми приемами.

Рассмотрим две исчезающие на бесконечности функции $\varphi(\xi)$ и $\chi(\xi)$. Образум с их помощью интеграл от $-\infty$ до $+\infty$

$$\int (b\varphi^*) \chi d\xi, \quad (4.4)$$

который согласно определению оператора b (3.15) тождественно равен интегралу

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \int \left\{ \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \varphi^* \right\} \chi d\xi. \quad (4.5)$$

Мы хотим перенести действие оператора $\xi + (d/d\xi)$ в интеграле (4.5) с функции φ^* на функцию χ . Поскольку ξ является лишь множителем, мы можем сразу расположить функции φ^* , ξ и χ в указанном порядке. Операцию дифференцирования функции φ^* по ξ перенесем на функцию χ с помощью интегрирования по частям, т. е. воспользуемся тождеством

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d}{d\xi} \varphi^* \right) \chi d\xi = \underbrace{\varphi^* \chi \Big|_{\xi=-\infty}^{+\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \frac{d}{d\xi} \chi d\xi,$$

откуда получим

$$(4.5) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int \varphi^* \left\{ \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \chi \right\} d\xi. \quad (4.6)$$

При этом мы использовали условие исчезновения функций φ и χ на бесконечности, которое справедливо для всех функций

гармонического осциллятора. Оператор

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \quad (4.7)$$

согласно определению (3.14) является оператором b^+ , так что в результате для (4.4) мы получаем

$$\int \varphi^* (b^+ \chi) d\xi. \quad (4.8)$$

Если объединить все промежуточные шаги, то конечный результат принимает вид

$$\int (b\varphi^*) \chi d\xi = \int \varphi^* (b^+ \chi) d\xi. \quad (4.9)$$

Таким же образом можно показать, что

$$\int (b^+ \varphi^*) \chi d\xi = \int \varphi^* (b\chi) d\xi_x \quad (4.10)$$

и, применяя этот прием n раз, получаем соотношение

$$\int ((b^+)^n \varphi^*) \chi d\xi = \int \varphi^* (b^n \chi) d\xi. \quad (4.11)$$

Соотношения (4.9) и (4.10) позволяют нам найти конечное выражение для средних значений чисто алгебраическим путем. Введем, далее, еще одно весьма четкое и часто используемое в литературе краткое обозначение. Вместо интеграла введем угловые скобки и соответственно этому напомним¹⁾

$$\int \Phi^* \chi d\xi = \langle \Phi | \chi \rangle. \quad (4.12)$$

Если между функциями χ и Φ^* стоит оператор b , то мы пишем

$$\int \Phi^* b \chi d\xi = \langle \Phi | b | \chi \rangle. \quad (4.13)$$

Если между указанными функциями стоит, наконец, какое-либо операторное выражение совершенно общего вида $\Omega(b^+, b)$, то мы пишем в этом случае

$$\int \Phi^* \Omega(b^+, b) \chi d\xi = \langle \Phi | \Omega(b^+, b) | \chi \rangle. \quad (4.14)$$

¹⁾ В литературе вместо обозначения (4.12) часто применяется еще и другое, согласно которому в скобках стоят не функции, а соответствующие квантовые числа. То есть делается замена $\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle \rightarrow \langle n | m \rangle$. Волновые функции, стоящие в скобках справа, записывают в виде $\Phi_m \rightarrow | m \rangle$, волновые функции Φ_n^* слева в скобках заменяют следующим образом: $\Phi_n^* \rightarrow \langle n |$. Согласно Дираку $\langle n |$ называют «бра», а $| m \rangle$ — «кет». Произведение $\langle n |$ и $| m \rangle$, имеющее вид $\langle n | m \rangle$, дает, следовательно, «бракет». Эти обозначения основаны на игре слов, поскольку по английски «bracket» — «скобка». Названия «бра» и «кет» теперь уже стали специальными терминами.

(Об операторных функциях такого рода мы обстоятельно поговорим в следующих параграфах.) Вторая вертикальная черта в выражениях (4.13) и (4.14), в общем, излишняя, и в последующем изложении иногда мы будем опускать ее.

Правые части выражений (4.12), (4.13) и (4.14) представляют собой не более как сокращения. Однако, как мы сейчас увидим, явные выражения интегралов нам более не нужны. Используем теперь эти новые краткие обозначения, чтобы переписать соотношения (4.9) и (4.10). Для этого мы положим

$$\Phi = b\varphi \quad (4.15)$$

и вместо (4.9) получаем

$$| \quad \langle b\varphi | \chi \rangle = \langle \varphi | b^+ | \chi \rangle. \quad (4.16)$$

Положив

$$\Phi = b^+\varphi, \quad (4.17)$$

вместо (4.10) получаем

$$| \quad \langle b^+\varphi | \chi \rangle = \langle \varphi | b | \chi \rangle \quad (4.18)$$

и, обобщая эти соотношения, находим

$$| \quad \langle \Omega\varphi | \chi \rangle = \langle \varphi | \Omega^+ | \chi \rangle. \quad (4.19)$$

Значок $+$ у Ω означает, как и везде в этой книге, эрмитово сопряжение: каждый стоящий в Ω^+ оператор нужно снабдить крестиком, причем следует полагать, что $b^{++} = b$. Кроме того, во всех произведениях следует поменять порядок следования операторов. Наконец, все числа следует заменить комплексно сопряженными. Покажем на *примере* операторного выражения $\Omega = \alpha(b^+)^n b^m$, как следует применять это правило:

$$\Omega^+ = \alpha^*((b)^m)^+((b^+)^n)^+ = \alpha^*(b^+)^m(b^{++})^n = \alpha^*(b^+)^m b^n.$$

Для того чтобы поближе познакомиться с применением нового формализма, рассмотрим

Пример. Определение нормировочной константы функции осциллятора. В § 3 мы определили собственные функции гармонического осциллятора в виде

$$\psi_n = N_n (b^+)^n \psi_0, \quad (4.20)$$

причем нормировочная константа N_n осталась неопределенной. Мы утверждаем, что эта нормировочная константа имеет вид

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}, \quad (4.21)$$

поскольку ψ_0 уже нормирована, что постоянно предполагается в дальнейшем. Доказательство поведем методом полной индукции.

1. Наше утверждение справедливо, учитывая предположение относительно ψ_0 , для $n = 0$.

2. Это утверждение уже доказано для $n = n_0$, т. е. ψ_{n_0} нормирована.

3. Покажем, что тогда оно справедливо также для $n = n_0 + 1$.
Для этого положим

$$\psi_{n_0+1} = C_{n_0+1} b^+ \psi_{n_0}, \quad (4.22)$$

причем C_{n_0+1} — постоянная, которую мы должны сейчас определить, а ψ_{n_0} , согласно индукционной посылке, считается нормированной.

Подставим (4.22) в условие нормировки

$$\langle \psi_{n_0+1} | \psi_{n_0+1} \rangle = 1. \quad (4.23)$$

Тогда для левой части (4.23) получаем

$$|C_{n_0+1}|^2 \langle b^+ \psi_{n_0} | b^+ \psi_{n_0} \rangle, \quad (4.24)$$

или, применяя соотношение (4.18),

$$|C_{n_0+1}|^2 \langle \psi_{n_0} | b b^+ \psi_{n_0} \rangle. \quad (4.25)$$

Далее мы используем перестановочное соотношение (3.18), после чего (4.25) принимает вид

$$|C_{n_0+1}|^2 \langle \psi_{n_0} | (b^+ b + 1) \psi_{n_0} \rangle. \quad (4.26)$$

Учитывая, наконец, что ψ_{n_0} является собственной функцией оператора Гамильтона $\hat{h} \omega b^+ b$, находим, что (4.26) принимает вид

$$|C_{n_0+1}|^2 (n_0 + 1) \langle \psi_{n_0} | \psi_{n_0} \rangle. \quad (4.27)$$

Согласно индукционной посылке, мы можем принять, что $\langle \psi_{n_0} | \psi_{n_0} \rangle$ нормирована на 1. С другой стороны, выражение (4.27), согласно (4.23), должно быть также равно 1, откуда мы получаем

$$|C_{n_0+1}|^2 (n_0 + 1) = 1.$$

Если считать коэффициент C_{n_0+1} действительным числом, то из предыдущего равенства находим

$$C_{n_0+1} = \frac{1}{\sqrt{n_0 + 1}}.$$

Если теперь подставить это выражение, а также (4.20) и (4.21) при $n = n_0$ в (4.22), то мы получим

$$\psi_{n_0+1} = \frac{1}{\sqrt{(n_0 + 1)!}} (b^+)^{n_0+1} \psi_0,$$

т. е. именно выражение вида (4.20) с учетом (4.21), однако для $n = n_0 + 1$.

Аналогичным образом можно доказать следующие формулы (задание 1 в конце этого параграфа):

$$\langle \psi_{n+1} | b^+ \psi_n \rangle = \sqrt{n+1}, \quad (4.28)$$

$$\langle \psi_{n-1} | b \psi_n \rangle = \sqrt{n}, \quad (4.29)$$

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{nm}. \quad (4.30)$$

Стоящие здесь волновые функции ψ_m зависят от безразмерной координаты ξ и могут быть собственными функциями гармонического осциллятора.

Обобщение на набор осцилляторов. Развитый только что формализм можно сразу же распространить на большое число осцилляторов. Для этого следует в соотношениях (4.16—4.19) приписать операторам b^+ , b индекс k . Операторное выражение Ω в (4.19) может также содержать операторы b , b^+ с различными индексами k .

Если $\Phi_{\{n\}}$ — функции (3.46), то справедливо, в частности*),

$$\langle \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_N} | \Phi_{m_1, m_2, \dots, m_N} \rangle = \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2} \dots \delta_{n_N m_N}, \quad (4.31)$$

или, в краткой форме,

$$\langle \Phi_{\{n\}} | \Phi_{\{m\}} \rangle = \prod_k \delta_{n_k m_k}. \quad (4.32)$$

В данном случае индекс k в произведении \prod пробегает значения целых чисел от 1 до N . В рассмотренных ниже случаях он может иметь также другой смысл, например, он может быть волновым числом. Далее, справедливы соотношения

$$\langle \Phi_{\{n\}} | b_j^+ | \Phi_{\{m\}} \rangle = \prod_{h \neq j} \delta_{n_h m_h} \delta_{n_j, m_j+1} \sqrt{m_j+1}, \quad (4.33)$$

$$\langle \Phi_{\{n\}} | b_j | \Phi_{\{m\}} \rangle = \prod_{h \neq j} \delta_{n_h m_h} \delta_{n_j, m_j-1} \sqrt{m_j}. \quad (4.34)$$

Произведения распространяются на все k , исключая $k = j$.

Задания к § 4

1. Вывести соотношения (4.28), (4.29), (4.30).

Указание.

а) (4.28): сделать $b^+ \psi_n$ нормированной функцией.

б) (4.29): применить (4.18) и сделать $b^+ \psi_{n-1}$ нормированной функцией.

*) Условие ортогональности. (Прим. перев.)

в) (4.30): рассмотреть отдельно а) $m = n$ и б) $m \neq n$.
 ва) Доказан выше (нормировка).
 вб) С помощью (4.18)... перевести (4.30) в выражение $\langle \psi_{m-1} | \psi_{n-1} \rangle$ и т. д., пока n или m не станет равным нулю. Тогда воспользоваться тем, что $b\psi_0 = 0$.

2. Вычислить для собственных функций гармонического осциллятора выражения

$$\langle \psi_n | (b^+)^2 | \psi_n \rangle, \quad \langle \psi_n | b^+ b | \psi_n \rangle, \quad \langle \psi_n | b b^+ | \psi_n \rangle, \quad \langle \psi_n | b^2 | \psi_n \rangle.$$

3. Считая, что (4.16) и (4.18) заданы наперед, доказать (4.19) для $\Omega = (b^+)^n b^m$.

Указание. Последовательно использовать сначала (4.18), затем (4.16).

4. С помощью интегрального представления (4.14) доказать, что

$$\langle \varphi | \chi \rangle^* = \langle \chi | \varphi \rangle,$$

а также $\langle \varphi | b^+ | \chi \rangle^* = \langle \chi | b | \varphi \rangle$, $\langle \varphi | b | \chi \rangle^* = \langle \chi | b^+ | \varphi \rangle$ и, наконец, $\langle \varphi | (b^+)^m b^n | \chi \rangle^* = \langle \chi | (b^+)^n b^m | \varphi \rangle$.

5. Вычислить ожидаемые значения $\int \varphi^*(\xi) \Omega(\xi) \varphi(\xi) d\xi$ для $\Omega(\xi) = \xi$; ξ^2 ; $d/d\xi$; $d^2/d\xi^2$, используя формализм операторов b , b^+ и «скобок» $\langle \dots | \dots \rangle$.

6. Пусть нормированные собственные функции двух несвязанных осцилляторов обозначены Φ_{n_1, n_2} (см. (3.46)). Показать, что

$$\langle \Phi_{n_1, n_2} | \Phi_{m_1, m_2} \rangle = \delta_{n_1, m_1} \delta_{n_2, m_2},$$

и вычислить следующие матричные элементы:

$$\langle \Phi_{n_1, n_2} b_1 \Phi_{m_1, m_2} \rangle, \quad \langle \Phi_{n_1, n_2} b_2^+ \Phi_{m_1, m_2} \rangle, \quad \langle \Phi_{n_1, n_2} b_1^+ b_2 \Phi_{m_1, m_2} \rangle.$$

7. Обобщая задание 4, исследовать набор N несвязанных осцилляторов с нормированными собственными функциями (3.46). Доказать выражения (4.32), (4.33), (4.34).

§ 5. Об обращении с бозе-операторами: мы учимся некоторым приемам

В квантовой теории поля нам приходится в еще большем, чем в квантовой механике, объеме общаться с операторами. По опыту известно, что это общение причиняет студентам трудности. Одни из них слишком неосторожны и обращаются с операторами как с обычными числами, при этом они быстро допускают ошибки в решении, а другим, слишком боязливым, операторы представляются ядовитыми змеями, с которыми по возможности лучше не иметь дела. Мы покажем здесь, что, немного поразмыслив, можно

научиться правильному обращению с операторами и они станут совершенно безобидными.

В этом параграфе мы рассмотрим только два основных оператора, а именно, оператор рождения b^+ и оператор уничтожения b . Эти операторы удовлетворяют перестановочному соотношению

$$bb^+ - b^+b = 1. \quad (5.1)$$

Перестановочное соотношение (5.1) является для последующего изложения основным. Теперь мы хотим последовательно поразмыслить о том, что можно делать с операторами и чего делать нельзя. Как мы знаем, следует постоянно представлять себе, что операторы действуют в конце концов на некоторую волновую функцию. В качестве простого примера этого рассмотрим линейную комбинацию двух волновых функций, а именно, волновой функции основного состояния гармонического осциллятора и волновой функции первого возбужденного состояния. Эту комбинацию можно представить в виде

$$\Phi = \beta\Phi_0 + \Phi_1 = \beta\Phi_0 + b^+\Phi_0. \quad (5.2)$$

В правой части волновую функцию основного состояния можно формально вынести за скобку и представить Φ в виде

$$\Phi = (\beta + b^+)\Phi_0. \quad (5.3)$$

На основное состояние Φ_0 действует новый оператор, который мы кратко обозначим \tilde{b}^+ . Из выражения

$$b^+ + \beta = \tilde{b}^+ \quad (5.4)$$

видно, что, добавляя к оператору b^+ обычное число, мы получаем новый оператор. Аналогично мы можем прибавить число к оператору уничтожения и получим тогда новый оператор \tilde{b} :

$$b + \beta^* = \tilde{b}. \quad (5.5)$$

Если в перестановочное соотношение (5.1) вместо операторов b и b^+ подставить операторы \tilde{b} и \tilde{b}^+ , то можно сразу удостовериться в том, что новые операторы \tilde{b} и \tilde{b}^+ также удовлетворяют перестановочному соотношению (5.1). Позже мы увидим, что это очень важное свойство бозе-операторов.

Проследим, однако, сначала в общих чертах, что получается из суперпозиции волновых функций. Как нам известно из квантовой механики, любую функцию Φ можно представить в общем случае в виде бесконечного ряда по собственным функциям ψ_n

$$\Phi = \sum_n c_n \psi_n. \quad (5.6)$$

Здесь мы имеем в виду собственную функцию гармонического

осциллятора, которая, как мы уже много раз видели, может быть представлена в виде

$$\psi_n = (b^+)^n \Phi_0, \quad (5.7)$$

причем нормировочную константу мы опустили. Если подставить (5.7) в (5.6), мы получим сразу

$$\Phi = \sum_n c_n (b^+)^n \Phi_0. \quad (5.8)$$

Теперь кажется, что Φ_0 можно вповь формально вынести за скобку, тогда правая часть (5.8) принимает вид

$$f(b^+) \Phi_0, \quad (5.9)$$

причем $f(b^+)$ определяется выражением

$$f(b^+) = \sum_n c_n (b^+)^n. \quad (5.10)$$

Мы подошли здесь вплотную к определению операторной функции. Эта функция строится следующим образом. Берем некоторую заданную функцию классической переменной $f(y)$, затем разлагаем ее в ряд Тейлора и заменяем везде переменную y и ее степени оператором b^+ и его степенями. Таким образом, мы получаем операторную функцию $f(b^+)$. Если специально выбрать коэффициенты разложения в виде

$$c_n = \frac{\alpha^n}{n!}, \quad (5.11)$$

то в качестве примера мы получаем операторную экспоненциальную функцию

$$e^{\alpha b^+} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (b^+)^n. \quad (5.12)$$

Как мы позже увидим, эта операторная экспоненциальная функция играет в теории гармонического осциллятора и тем самым в квантовой теории поля и в ее приложениях к физике твердого тела и квантовой оптике чрезвычайно важную роль.

Функция (5.10) зависит только от оператора рождения b^+ . Можно, конечно, из операторов b^+ и b образовать любые степени и произведения, при этом, однако, следует обратить внимание на точный порядок следования операторов b^+ и b . На основании перестановочного соотношения (5.1) операторы b и b^+ могут быть расставлены в желаемом порядке, так что, например, bb^+ можно выразить через $1 + b^+b$. При этом особенно важными являются два основных вида расположения операторов.

1. Так называемая *нормально упорядоченная функция*. Эта функция состоит из сумм степеней вида $(b^+)^m b^n$, причем в каждом члене суммы справа стоит оператор уничтожения, а слева

стоит оператор рождения. Такая операторная функция имеет следующий общий вид:

$$\sum_{mn} c_{mn} (b^+)^m b^n. \quad (5.13)$$

2. Наряду с такой функцией имеются *антинормально упорядоченные функции*, которые состоят из слагаемых вида

$$b^m (b^+)^n, \quad (5.14)$$

причем операторы рождения стоят справа, а операторы уничтожения стоят слева. Функции антинормально упорядоченных операторов имеют следующий общий вид:

$$\sum_{mn} d_{mn} b^m (b^+)^n. \quad (5.15)$$

Как отчетливо видно из этих примеров, с операторами можно обращаться как с обычными числами, за двумя исключениями.

1. Должен соблюдаться точно порядок следования операторов. Этот порядок может изменяться только при применении перестановочного соотношения (5.1).

2. Здесь мы должны указать на одно свойство, о котором еще явно не упоминалось, а именно, что нельзя делить на оператор b^{-1} . Тем не менее можно, например, образовать обратный оператор вида

$$\frac{1}{\beta + b}. \quad (5.16)$$

Этот оператор должен вычисляться следующим образом: выражение (5.16) рассматривается как функция b и разлагается в ряд по степеням оператора b .

Нам нужно научиться некоторым очень полезным приемам, которые позволяют простым образом вычислять операторные вы-

1) Это видно из следующих рассуждений: будем исходить из, без сомнения, верного равенства

$$\Phi = b\Phi_0. \quad (*)$$

Умножим обе части его на b^{-1} :

$$b^{-1}\Phi = \Phi_0. \quad (**)$$

Если в качестве волновой функции Φ_0 выбрать основное состояние осциллятора, то согласно (*) должно быть $\Phi = 0$ и, следовательно, также $b^{-1}\Phi = 0$, в противоречие с (**), где $\Phi_0 \neq 0$.

ражения. Мы утверждаем, что справедливы следующие соотношения:

$$b(b^+)^n - (b^+)^n b = n(b^+)^{n-1} = \frac{\partial (b^+)^n}{\partial b^+}, \quad (5.17)$$

$$b^+(b)^n - (b)^n b^+ = -nb^{n-1} = -\frac{\partial (b^n)}{\partial b}. \quad (5.18)$$

Соотношение (5.17) можно, прочитав его слева направо, интерпретировать следующим образом: перестановка n -й степени оператора b^+ с оператором b равнозначна простому дифференцированию функции $(b^+)^n$ по b^+ . Доказательство соотношения (5.17) мы проведем с помощью метода полной индукции. Для $n=1$ это соотношение действительно справедливо, поскольку оно согласуется с исходным перестановочным соотношением (5.1).

1. $n=1$:

$$bb^+ - b^+b = 1 \equiv 1 \cdot (b^+)^0.$$

2. Примем, что соотношение (5.17) уже доказано для $n=n_0$.

$n=n_0$:

$$b(b^+)^{n_0} - (b^+)^{n_0}b = n_0(b^+)^{n_0-1}. \quad (5.18a)$$

3. Покажем, что оно справедливо для $n=n_0+1$.

Выпишем соответствующую левую сторону (5.17) для $n=n_0$:

$$b(b^+)^{n_0+1} - (b^+)^{n_0+1}b$$

и преобразуем ее следующим образом:

$$b(b^+)^{n_0}b^+ - (b^+)^{n_0+1}b. \quad (5.19)$$

Здесь мы явно пользуемся тем, что для этих операторов справедлив ассоциативный закон. Первый член $b(b^+)^{n_0}$ в (5.19) мы выразим через другие присутствующие в (5.17) члены. Тогда (5.19) принимает вид

$$(b^+)^{n_0}bb^+ + n_0(b^+)^{n_0} - (b^+)^{n_0+1}b. \quad (5.20)$$

Если теперь применить к стоящему в первом члене в (5.20) произведению bb^+ перестановочное соотношение (5.1), то мы получаем

$$(b^+)^{n_0}(b^+b+1) + n_0(b^+)^{n_0} - (b^+)^{n_0+1}b, \quad (5.21)$$

что можно в кратком виде записать как

$$(n_0+1)(b^+)^{n_0}. \quad (5.22)$$

Мы доказали соотношение (5.17) также для $n_0 + 1$ и тем самым для общего случая. Соответственно, конечно, доказывается соотношение (5.18). Обобщим теперь выражения (5.17) и (5.18) на случай любой функции b^+ или b . Если разложить функцию $f(b^+)$ в ряд по степеням (5.10), то для каждой отдельной степени выполняется соотношение (5.17) или (5.18). Если просуммировать все степени с соответствующими коэффициентами, то непосредственно получаем

$$\left| \begin{array}{l} b f(b^+) - f(b^+) b = \frac{\partial f(b^+)}{\partial b^+}, \end{array} \right. \quad (5.23)$$

или

$$\left| \begin{array}{l} b^+ f(b) - f(b) b^+ = -\frac{\partial f(b)}{\partial b}. \end{array} \right. \quad (5.24)$$

Если применить (5.23) или (5.24) к специальному случаю экспоненциальной функции, то непосредственно получается:

$$b e^{\alpha b^+} - e^{\alpha b^+} b = \alpha e^{\alpha b^+} \quad (5.25)$$

и

$$b^+ e^{\alpha b} - e^{\alpha b} b^+ = -\alpha e^{\alpha b}. \quad (5.26)$$

Для экспоненциальной функции мы можем, естественно, всегда найти обратную функцию, для чего нужно лишь поменять знак показателя экспоненты. Умножив теперь (5.25) слева на $e^{-\alpha b^+}$ и преобразовав равенства, получим

$$\left| \begin{array}{l} e^{-\alpha b^+} b e^{\alpha b^+} = b + \alpha. \end{array} \right. \quad (5.27)$$

Поступая соответствующим образом с (5.26), получаем:

$$\left| \begin{array}{l} e^{-\alpha b} b^+ e^{\alpha b} = b^+ - \alpha. \end{array} \right. \quad (5.28)$$

Соотношения (5.27) и (5.28), как мы увидим позже, являются очень важными.

Попытаемся теперь аналогичным образом упростить следующее выражение:

$$e^{-\alpha b^+} e^{\beta b} e^{\alpha b^+} = ? \quad (5.29)$$

Для того чтобы решить эту задачу, мы займемся прежде общей проблемой, которая часто встречается в квантовой теории поля. А именно, речь идет о том, чтобы вычислить выражение вида

$$V^{-1} e^W V. \quad (5.30)$$

При этом V и W могут быть произвольными операторными функциями. В данном случае V и W имеют вид

$$V = e^{\alpha b^+} \quad (5.31)$$

и

$$W = \beta b. \quad (5.32)$$

Мы утверждаем, что в самом общем случае, независимо от конкретного вида V и W , выражение (5.30) можно представить в виде

$$e^{(V^{-1}WV)}. \quad (5.33)$$

Для этого мы разложим экспоненциальную функцию в (5.30) в степенной ряд и получим

$$(5.30) = V^{-1} \left(1 + W + \dots + \frac{1}{n!} W^n + \dots \right) V. \quad (5.34)$$

Рассмотрим каждый член степенного ряда, причем вставим между каждым множителем W единицу:

$$V^{-1}W^nV = V^{-1}W \cdot 1 \cdot W \cdot 1 \cdot W \dots WV. \quad (5.35)$$

Представим теперь единицу несколько более сложным образом, а именно, в виде

$$1 = V \cdot V^{-1}. \quad (5.36)$$

Тогда правую сторону (5.35) можно переписать следующим образом:

$$(V^{-1}WV)(V^{-1}WV) \dots (V^{-1}WV), \quad (5.37)$$

что приводит, естественно, к выражению следующего вида:

$$(V^{-1}WV)^n. \quad (5.38)$$

Подставляя теперь результат (5.38) с учетом (5.35) в (5.34) и снова суммируя экспоненциальный ряд, мы получаем соотношение

$$| \quad V^{-1}e^{WV}V = e^{(V^{-1}WV)}. \quad (5.39)$$

Данный пример показывает, что наше доказательство никоим образом не ограничивается экспоненциальными функциями, а может быть применено к любой разложимой в степенной ряд функции $f(W)$:

$$V^{-1}f(W)V = f(V^{-1}WV). \quad (5.40)$$

Результат (5.39) позволяет нам решить нашу задачу

$$e^{-\alpha b^+} e^{\beta b} e^{\alpha b^+} = ?$$

Теперь мы можем сразу написать ответ

$$e^{-\alpha b^+} e^{\beta b} e^{\alpha b^+} = e^{\beta \tilde{b}}, \quad (5.41)$$

причем \tilde{b} определяется выражением

$$\tilde{b} = e^{-\alpha b^+} b e^{\alpha b^+}. \quad (5.42)$$

Выражение (5.42) мы уже вычислили в явном виде. Используя (5.27), получаем

$$\tilde{b} = b + \alpha. \quad (5.43)$$

Отсюда находим окончательный результат

$$\left\{ e^{-\alpha b^+} e^{\beta b} e^{\alpha b^+} = e^{\beta b} e^{\alpha \beta}. \right. \quad (5.44)$$

Эти промежуточные вычисления позволяют нам решить весьма важную задачу, а именно, превратить преобразование с $V = e^{\alpha b^+}$ в так называемое унитарное преобразование. Унитарное преобразование определяется тем, что для осуществляющего это преобразование оператора U справедливо следующее соотношение:

$$U^+ = U^{-1}, \quad (5.45)$$

т. е. эрмитово сопряженный оператор тождествен обратному оператору. Вопрос, следовательно, состоит в том, каким образом можно свести $e^{\alpha b^+}$ к унитарному оператору. Для этого построим вначале оператор

$$A = e^{\alpha b^+} e^{-\alpha^* b} \quad (5.46)$$

и посмотрим, как выглядит эрмитово сопряженный оператору A оператор A^+ . Согласно правилу, изложенному на стр. 34, оператор A^+ получается следующим образом: оператор b заменяем на оператор b^+ , крестик у оператора b^+ снимаем, заменяем α на α^* и α^* на α , т. е. на комплексно сопряженные величины, и, наконец, обращаем порядок следования операторов. Тогда получаем выражение

$$A^+ = e^{-\alpha b^+} e^{\alpha^* b}. \quad (5.47)$$

Умножая теперь A^+ на A :

$$A^+ A = e^{-\alpha b^+} e^{\alpha^* b} e^{\alpha b^+} e^{-\alpha^* b}, \quad (5.48)$$

мы видим, что три первых множителя в правой части (5.48) имеют тот же вид, что и левая часть выражения (5.41). Поэтому мы можем прямо вычислить произведение операторов и получаем

$$A^+ A = e^{\alpha^* b} e^{|\alpha|^2} e^{-\alpha^* b}, \quad (5.49)$$

что можно упростить далее:

$$A^+ A = e^{|\alpha|^2}, \quad (5.50)$$

поскольку все величины здесь можно переставлять.

Если бы A был унитарным оператором, то в правой части (5.50) стояла бы 1, а не $e^{|\alpha|^2}$. Следовательно, мы должны попытаться подправить этот результат, введя такой новый оператор, чтобы обе части (5.50) можно было сократить на число, стоящее в правой части (5.50). Этого можно достичь следующим выбором оператора U :

$$| \quad U = e^{-(1/2)|\alpha|^2} e^{\alpha b^+} e^{-\alpha^* b}. \quad (5.51)$$

В силу своей конструкции U является унитарным оператором и удовлетворяет соотношению (5.45). Как можно показать, оператор U можно представить в существенно более «красивой» форме

$$U = e^{\alpha b^+ - \alpha^* b}, \quad (5.51a)$$

откуда сразу видно, что U действительно является унитарным оператором. В последующем изложении, однако, мы будем постоянно использовать выражение (5.51). С помощью этого унитарного оператора U мы можем теперь вновь преобразовать операторы b и b^+ и, применяя (5.27) или (5.28), получим

$$| \quad \tilde{b} = U^+ b U = b + \alpha, \quad (5.52)$$

$$| \quad \tilde{b}^+ = U^+ b^+ U = b^+ + \alpha^*. \quad (5.53)$$

Унитарный оператор U играет, как мы сейчас увидим, важную роль в теории смещенного гармонического осциллятора.

Наряду с только что рассмотренным оператором, в котором показатель экспоненты *линеен* по b или b^+ , имеется другой важный оператор, в котором b и b^+ присутствуют *одновременно*. Спрашивается, каким образом следует вычислять выражение

$$f(\alpha) = e^{\alpha b^+ b} b e^{-\alpha b^+ b} \quad (5.54)$$

Как было уже указано, будем считать это выражение функцией параметра α . Выведем для $f(\alpha)$ дифференциальное уравнение, в котором (5.54) дифференцируется по α . Учитывая точный порядок следования операторов, получаем тогда

$$f'(\alpha) = e^{\alpha b^+ b} (b^+ b b - b b^+ b) e^{-\alpha b^+ b}. \quad (5.55)$$

Из выражения, стоящего в скобках, вынесем за скобки направо оператор b , тогда получим

$$e^{\alpha b^+ b} (b^+ b - b b^+) b e^{-\alpha b^+ b}. \quad (5.56)$$

Новое выражение в скобках представляет собой с точностью до знака левую часть перестановочного соотношения (5.1), так что (5.56) переходит в выражение

$$-e^{\alpha b^+ b} b e^{-\alpha b^+ b} \equiv -f(\alpha). \quad (5.57)$$

Сравнение (5.55) с (5.57) приводит к дифференциальному уравнению для f :

$$f'(\alpha) = -f(\alpha) \quad (5.58)$$

с решением

$$f(\alpha) = e^{-\alpha} \cdot C, \quad (5.59)$$

причем постоянная интегрирования C определяется с помощью «начального условия» при $\alpha = 0$. Согласно (5.54) должно быть

$$f(0) = b,$$

где b — оператор уничтожения. Сравнивая это выражение с (5.59), мы видим, что постоянная интегрирования C равна оператору b . На первый взгляд это кажется странным, однако ничего странного здесь нет, поскольку ведь $f(\alpha)$ согласно (5.54) является операторной функцией. Отсюда в качестве конечного результата находим соотношение

$$| e^{\alpha b^+ b} b e^{-\alpha b^+ b} = e^{-\alpha} b. \quad (5.60)$$

Аналогичным образом доказывается следующее соотношение:

$$| e^{\alpha b^+ b} b^+ e^{-\alpha b^+ b} = e^{\alpha} b^+. \quad (5.61)$$

Итак, для чисто мнимого α оператор $e^{\alpha b^+ b}$ является унитарным.

З а д а н и я к § 5

1. Положить в (5.51а) $\alpha = -(1/\sqrt{2})\xi_0$, где α — действительное число. Используя (3.14) и (3.15), убедиться, что $U\varphi(\xi)$ является не чем иным, как разложением по степеням $\varphi(\xi + \xi_0)$.

2. Показать, что если ψ_0 нормирована, то нормирована и функция $\psi = U\psi_0$, причем оператор U задан выражением (5.51).
У к а з а н и е: Применить (4.19) и (5.45).

3. Пусть ψ_0 — волновая функция основного состояния осциллятора, U — преобразование (5.51) и $\psi = U\psi_0$. Показать, что а) $\langle \psi | b | \psi \rangle = \alpha$, б) $\langle \psi | b^+ | \psi \rangle = \alpha^*$.

У к а з а н и е. а) Поскольку $b\psi_0 = 0$, то можно написать $bU\psi_0 = (bU - Ub)\psi_0$. Затем применить (5.23) и задание 2.

б) Применить (4.16), читая его справа налево.

4. В задаче 4 к § 3 положить $c_n = e^{-(1/2)|\gamma|^2} \gamma^n \frac{1}{\sqrt{n!}}$ и убедиться в том, что при этом для волновой функции ψ получается следующее выражение:

$$\psi = \exp\left\{-\frac{1}{2}|\gamma|^2 + \gamma b^+ e^{-i\omega t}\right\} \psi_0,$$

причем ψ нормирована.

5. Почему $e^A e^B \neq e^{A+B}$, если $[A, B] \neq 0$?

§ 6. Смещенный гармонический осциллятор: преобраз элементарных возбуждений в твердом теле

Продолжим исследование квантовомеханического гармонического осциллятора, который описывается с помощью безразмерной координаты ξ . Предположим теперь, что этот гармонический осциллятор подвержен действию еще одной, независимой от времени силы $\sqrt{2}\gamma\hbar\omega$. (В упражнении 4 мы распространим эти результаты на зависящую от времени силу.) Уравнение Шредингера имеет вид

$$\left\{-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}\xi^2 - \sqrt{2}\gamma\xi\right\}\psi(\xi) = \varepsilon\psi(\xi), \quad (6.1)$$

причем безразмерная энергия определяется выражением

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}. \quad (6.2)$$

Уравнение (6.1) можно интерпретировать и совершенно иным образом: это уравнение описывает осциллятор, положение равновесия которого находится в $\xi_0 = \gamma\sqrt{2}$ (рис. 14, 15). Решение в этой последней формулировке тривиально: вместо старой координаты ξ вводят новую смещенную координату, так что в новой системе координат положение равновесия находится в начале координат. Однако мы хотим решить эту проблему другим способом, с помощью операторов b и b^+ , поскольку отсюда можно заимствовать важный метод исследования тех проблем твердого тела, с которыми мы встретимся позже. Множитель при ξ мы написали в несколько искусственном виде $\sqrt{2}\gamma$, чтобы позже получить некоторое упрощение. Если снова ввести вместо координаты ξ операторы рождения и уничтожения, согласно обратным (3.14) и (3.15) соотношениям

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(b + b^+), \quad (6.3)$$

$$\frac{d}{d\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(b - b^+), \quad (6.4)$$

то (6.1) переходит непосредственно в уравнение

$$\{b^+b - \gamma(b^+ + b)\} \psi = \varepsilon' \psi, \quad (6.5)$$

причем для краткости мы положили

$$\varepsilon' = \varepsilon - \frac{1}{2}. \quad (6.6)$$

Будем искать решение проблемы смещенного гармонического осциллятора двумя различными способами.

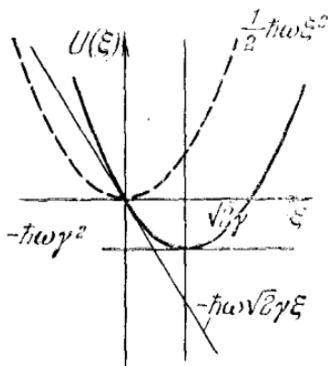


Рис. 14. Вид кривой потенциальной энергии смещенного гармонического осциллятора. Вершина параболы находится в точке с координатами $(\sqrt{2}\gamma, -\hbar\omega\gamma^2)$. Штриховой линией представлен потенциал несмещенного осциллятора.

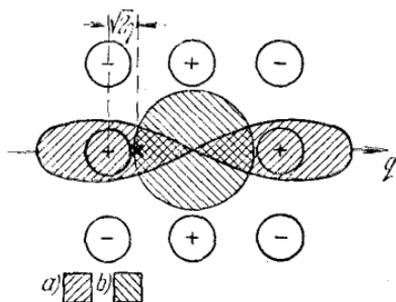


Рис. 15. Прямой пример применения смещенного гармонического осциллятора (схематически). Колебания ионов в F -центре (центре окраски). В полярном кристалле (например, в NaCl) отсутствует отрицательный ион. Его место занято электроном. В зависимости от состояния возбуждения электрон имеет различные распределения заряда (заштриховано). Это в свою очередь ведет к изменению поля ионов. *a*) Положение с наименьшей потенциальной энергией для иона, отмеченного более жирным кружком, находится в точке (+) (распределение заряда электрона до перехода). *b*) Положение с наименьшей потенциальной энергией теперь смещено вправо (зарядовое распределение электрона концентрируется правее) и находится где-то возле точки (X) (распределение заряда электрона после перехода).

1. Первый путь решения. Рассмотрим левую сторону уравнения (6.5). Если бы b^+ и b были не операторами, а обычными числами, то члены, линейные по b^+ и b , которые присутствуют в (6.5), можно было бы устранить, используя линейное преобразование вида

$$b = \tilde{b} + \gamma, \quad b^+ = \tilde{b}^+ + \gamma. \quad (6.7)$$

Как мы уже отметили ранее, новые операторы \tilde{b} и \tilde{b}^+ также удо-

влетворяют перестановочному соотношению для бозе-частиц:

$$\tilde{b}\tilde{b}^+ - \tilde{b}^+\tilde{b} = 1. \quad (6.8)$$

Поэтому действительно кажется естественным применить преобразование (6.7). Если мы одновременно вместо старой функции ψ , связанной с операторами b^+ и b , введем новую функцию φ , которая связана теперь с операторами \tilde{b}^+ :

$$\psi(b^+) = \varphi(\tilde{b}^+), \quad (6.9)$$

то уравнение (6.5) примет вид

$$(\tilde{b}^+\tilde{b} - \gamma^2)\varphi(\tilde{b}^+) = \varepsilon'\varphi(\tilde{b}^+). \quad (6.10)$$

Если, наконец, с помощью соотношения

$$\varepsilon' = \bar{\varepsilon} - \gamma^2 \quad (6.11)$$

ввести новую энергию $\bar{\varepsilon}$, то (6.10) можно окончательно представить в виде

$$\tilde{b}^+\tilde{b}\varphi = \bar{\varepsilon}\varphi. \quad (6.12)$$

Но это уравнение в точности совпадает с уравнением гармонического осциллятора. Поскольку операторы \tilde{b} и \tilde{b}^+ удовлетворяют обычным перестановочным соотношениям (6.8), мы можем непосредственно построить собственные функции и собственные значения уравнения (6.12). Тогда с помощью процедуры, которая нам известна из § 3, в качестве собственной волновой функции уравнения (6.12) мы получим функцию

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\tilde{b}^+)^n \varphi_{0z} \quad (6.13)$$

причем основное состояние определяется следующим свойством:

$$\tilde{b}\varphi_0 = 0. \quad (6.14)$$

Собственные значения уравнения (6.12) имеют вид

$$\bar{\varepsilon}_n = n \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (6.15)$$

Следовательно, собственные значения уравнения (6.5) даются выражением

$$| \quad \varepsilon' = n - \gamma^2. \quad (6.16)$$

Собственные значения смещенного осциллятора мы получим согласно (6.2), умножив (6.16) на $\hbar\omega$ и приняв во внимание (6.6):

$$E = \hbar\omega (n - \gamma^2 + 1/2).$$

Здесь также явно учтена нулевая энергия $(\frac{1}{2})\hbar\omega$.

В (6.14) мы определили основное состояние с помощью смещенных операторов. Какой вид имеет основное состояние относительно первоначального оператора b^+ ? Подставляя (6.7) и (6.9) в (6.14), получим уравнение для смещенного основного состояния:

$$\tilde{b}\psi_0 \equiv (b - \gamma)\psi_s(b^+) = 0. \quad (6.17)$$

Функции $\psi(b^+)$, которые удовлетворяют идентичному (6.17) уравнению

$$b\psi(b^+) = \gamma\psi(b^+),$$

называются когерентными состояниями. Они играют в квантовой оптике фундаментальную роль.

Смещенное состояние, естественно, должно быть представимо через несмещенные собственные функции гармонического осциллятора. Чтобы показать, как это делается, проведем одно формальное преобразование. Мы видели в § 5 (см. (5.6—5.10)), что любую функцию можно представить в виде

$$\psi_s = f(b^+)\psi_0, \quad (6.18)$$

причем функция f подлежит еще определению. Функция ψ_0 является функцией основного состояния, которое, как обычно, определяется свойством

$$b\psi_0 = 0. \quad (6.19)$$

Подставим (6.18) в (6.17):

$$(bf(b^+) - f(b^+)b)\psi_0 = \gamma f(b^+)\psi_0. \quad (6.20)$$

Второй член в левой части выражения (6.20) в силу (6.19) равен нулю; мы добавили его по соображениям, которые тотчас станут очевидными. Коммутатор b и $f(b^+)$ в левой части уравнения (6.20) можно упростить, используя соотношение (5.23), тогда вместо (6.20) мы получаем следующее уравнение:

$$\frac{\partial f(b^+)}{\partial b^+} \psi_0 = \gamma f(b^+) \psi_0. \quad (6.21)$$

Это уравнение всегда разрешимо, если функцию $f(b^+)$ можно определить так, чтобы она удовлетворяла уравнению

$$\frac{\partial f(b^+)}{\partial b^+} = \gamma f(b^+). \quad (6.22)$$

Уравнение (6.22) имеет следующее решение:

$$f(b^+) = c_0 e^{\gamma b^+}. \quad (6.23)$$

Если подставить явный вид решения (6.23) в (6.18), то мы дей-

ствительно получим представление *основного состояния* смещенного осциллятора через волновую функцию *основного состояния* несмещенного осциллятора:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_g(b^+) = c_0 e^{\gamma b^+} \psi_0, \end{array} \right. \quad (6.24)$$

где c_0 — множитель, подлежащий еще определению с помощью условия нормировки. Как мы увидим ниже, он равен

$$c_0 = e^{-(1/2)|\gamma|^2}. \quad (6.25)$$

До сих пор мы конструировали только основное состояние. Теперь, однако, с помощью исходных операторов b^+ и b мы можем сразу найти также и возбужденные состояния. Для этого следует лишь выразить \tilde{b}^+ и ψ_0 в (6.13) через (6.7) и (6.24). Тогда оказывается, что решение для возбужденных состояний имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_n(b^+) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+ - \gamma)^n \underbrace{e^{-(1/2)|\gamma|^2} e^{\gamma b^+} \psi_0}_{\psi_g}. \end{array} \right. \quad (6.26)$$

Итак, нам удалось решить уравнение Шредингера (6.5) в явном виде.

Прежде чем мы обсудим второй путь решения, рассмотрим наши результаты (6.13) или (6.26) с точки зрения последующих приложений к проблемам твердого тела. Как следует из вида основного состояния для смещенного осциллятора, это основное состояние имеет мало общего с основным состоянием несмещенного гармонического осциллятора. Тем не менее, исходя из смещенного основного состояния, можно снова создать возбужденные состояния, которые имеют «бозевский» характер¹⁾, для чего следует подействовать новым оператором рождения \tilde{b}^+ на смещенное основное состояние. Мы столкнемся с совершенно аналогичной проблемой, например, при изучении плазменных колебаний в твердом теле. Хотя основное состояние такой системы не имеет практически ничего общего с основным состоянием невзаимодействующей системы, однако мы можем создать возбужденные состояния с помощью многократного применения бозе-операторов. Аналогичная ситуация встретится нам и в теории сверхпроводимости.

Теперь мы сделаем еще один очень важный шаг, который прямо приведет к важным приложениям в теории сверхпроводимости. А именно, мы покажем, что можно найти все возбужденные состояния гармонического осциллятора, если только удастся

¹⁾ Как будет еще раз пояснено в § 12, частицы, операторы рождения и уничтожения которых удовлетворяют перестановочным соотношениям (6.8), называются *бозе-частицами*.

найти такое унитарное преобразование, которое ведет от основного состояния несмещенной системы к основному состоянию смещенной системы. Как мы сейчас увидим, для гармонического осциллятора нам удастся сконструировать это преобразование в явном виде. В этом нам помогут приемы, с которыми мы познакомились в § 5. Итак, мы переходим ко

второму пути решения¹⁾. Будем исходить из волновой функции основного состояния смещенного осциллятора

$$\psi_g = c_0 e^{\gamma b^+} \psi_0, \quad (6.27)$$

причем c_0 — нормировочная постоянная, которую мы сейчас найдем. Выражение (6.27) дает нам, если угодно, преобразование старого основного состояния ψ_0 в новое состояние ψ_g посредством оператора

$$A = c_0 e^{\gamma b^+}. \quad (6.28)$$

Этот оператор, однако, имеет вид экспоненциального оператора, который мы обстоятельно исследовали еще в § 5. Мы видели, что преобразование, в котором участвует оператор A , можно превратить в унитарное преобразование, добавив множители $e^{-\gamma b}$ и $e^{-(1/2)|\gamma|^2}$. Добавка множителя $e^{-\gamma b}$ фактически ничего не меняет, поскольку b или любая степень b , действующая на ψ_0 , всегда дает нуль и от всей экспоненциальной функции остается только единица. Тем самым мы находим искомое преобразование

$$\psi_g = \underbrace{e^{-(1/2)|\gamma|^2} e^{\gamma b^+} e^{-\gamma b}}_U \psi_0. \quad (6.29)$$

Поскольку преобразование U , согласно § 5, унитарно, функция ψ_g автоматически оказывается нормированной на единицу, если предполагается, как обычно, что ψ_0 нормирована (см. задание 2 из § 5). Сравнение (6.27) и (6.29) дает затем

$$c_0 = e^{-(1/2)|\gamma|^2}. \quad (6.29a)$$

Введем теперь в совершенно общем виде новое преобразование между искомым решением ψ уравнения Шредингера (6.5) и новой функцией χ

$$\psi = U\chi, \quad (6.30)$$

где U дается в (6.29). После подстановки (6.30) в (6.5) получаем

$$\{b^+b - \gamma(b^+ + b)\}U\chi = \epsilon' U\chi; \quad (6.31)$$

¹⁾ Этот раздел при первом чтении также можно пропустить.

умножив это уравнение слева на U^{-1} , находим

$$U^{-1}\{b+b - \gamma(b^+ + b)\}U\chi = \varepsilon'\chi. \quad (6.32)$$

Нам уже известно, как действует преобразование U на операторы b^+ и b . Например, справедливо равенство

$$U^{-1}b^+U = b^+ + \gamma, \quad (6.33)$$

а также $U^{-1}b^+bU \equiv U^{-1}b^+U \cdot U^{-1}bU = (b^+ + \gamma)(b + \gamma)$. Мы видим, таким образом, что преобразование U действует как сдвиг операторов b и b^+ . Следовательно, уравнение (6.32) можно привести к виду

$$(b^+b - \gamma^2)\chi = \varepsilon'\chi. \quad (6.34)$$

Собственные функции определяются сразу. Они имеют вид

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+)^n \chi_0, \quad (6.35)$$

причем можно установить тождественность χ_0 с ψ_0 , определяемой уравнением (6.27):

$$\chi_0 \equiv \psi_0, \quad b\psi_0 = 0. \quad (6.36)$$

С помощью преобразования (6.30) можно вновь перейти от (6.35) к искомым волновым функциям ψ . При этом мы получим

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} U (b^+)^n U^{-1} U \psi_0. \quad (6.37)$$

Множитель $U^{-1}U$ равен, естественно, единице и введен только для того, чтобы сделать возможным преобразование выражения (6.37) в выражение

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} (Ub^+U^{-1})^n \psi_g. \quad (6.38)$$

При этом мы использовали соотношение (5.40). Учитывая еще, наконец, соотношение

$$Ub^+U^{-1} = b^+ - \gamma, \quad (6.39)$$

мы непосредственно обнаруживаем, что (6.38) тождественно совпадает с (6.26). Большое преимущество этого рассмотрения состоит в том, что благодаря применению унитарного преобразования (6.29) наша проблема может быть сведена к существенно более простой проблеме (6.34).

Задания к § 6

1. Для комплексного γ уравнение Шредингера имеет вид

$$\hbar\omega (b^+b - \gamma b - \gamma^* b^+) \psi = E\psi.$$

Используя методы § 6, найти ψ и E .

2. Оператор Гамильтона набора несвязанных, но смещенных гармонических осцилляторов имеет вид

$$H = \sum_k \hbar \omega_k (b_k^+ b_k - \gamma_k b_k - \gamma_k^* b_k^+).$$

Показать, что волновая функция основного состояния дается выражением ($b_k \Phi_0 = 0$)

$$\Phi = \prod_k \exp \left\{ -\frac{1}{2} |\gamma_k|^2 \right\} \exp \{ \gamma_k^* b_k^+ \} \exp \{ -\gamma_k b_k \} \Phi_0.$$

Соответствующая энергия равна

$$E = - \sum_k \hbar \omega_k |\gamma_k|^2. \quad (\text{Доказательство?})$$

3. Пусть упруго связанный примесный атом находится в положении равновесия в основном состоянии. Благодаря электронному переходу условия связи изменяются, так что потенциал, согласно рис. 14, оказывается смещенным. Электронный переход при этом происходит настолько быстро, что ядро (координата q , одномерная модель) остается в прежнем положении (принцип Кондона). Сколько в среднем фононов (квантов колебания) содержит колебательное состояние около нового положения равновесия?

Указание. Вычислить $\langle \psi | b^+ b | \psi \rangle$, где ψ — волновая функция смещенного осциллятора.

4. В уравнении Шредингера

$$\hbar \omega (b^+ b - \gamma b - \gamma^* b^+) \psi = i \hbar \dot{\psi} \quad (\text{A 6.1})$$

величины γ , γ^* зависят от времени. Решить (A 6.1), используя подстановку

$$\psi(t) = e^{f(t)} e^{g(t)b^+} \psi_0 \quad (\text{при } b \psi_0 = 0),$$

и определить $f(t)$ и $g(t)$ как интегралы от $\gamma(t)$, $\gamma^*(t)$. Вычислить средние значения

$$\bar{b} = \langle \psi | b | \psi \rangle, \quad \bar{b}^+ = \langle \psi | b^+ | \psi \rangle$$

(см. задание 3 к § 5) и показать, что они удовлетворяют уравнениям

$$(d/dt) \bar{b}^+ = i \omega \bar{b}^+ - i \omega \gamma(t), \quad (d/dt) \bar{b} = -i \omega \bar{b} + i \omega \gamma^*(t).$$

§ 7. Линейная цепочка атомов: классическое рассмотрение

Рассмотрим линейную атомную цепочку, все атомы которой имеют равные массы M и их положения равновесия находятся на равных расстояниях a . Атомы мы перенумеруем индексом l , а отклонение l -го атома из положения равновесия обозначим через q_l (рис. 16). Буква l должна, таким образом, указывать место расположения атома (т. е. координату равновесного положения центра тяжести атома).

Для простоты мы ограничимся продольными отклонениями. Связь между атомами описывается гармонической силой с константой упругости K (рис. 17). Тогда Ньютоновское уравнение движения l -го атома имеет следующий вид:

$$M\ddot{q}_l(t) = K(q_{l+1}(t) - q_l(t)) - K(q_l(t) - q_{l-1}(t)). \quad (7.1)$$

Приведя подобные члены в правой части уравнения (7.1), запишем его в более кратком виде

$$M\ddot{q}_l = K(q_{l+1} + q_{l-1} - 2q_l). \quad (7.2)$$

Будем считать, что цепочка циклически замкнута, так что для координат выполняется периодическое граничное условие

$$q_v = q_{v+N}, \quad (7.3)$$

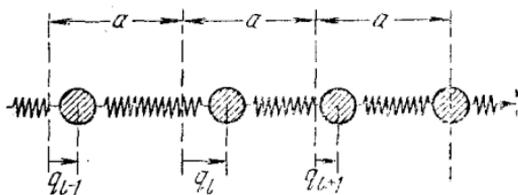


Рис. 16. Линейная атомная цепочка.

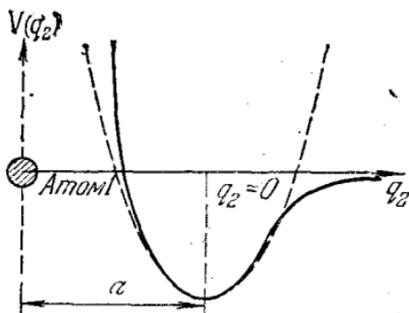


Рис. 17. Энергия взаимодействия между атомами 1 и 2. Атом 1 закреплен в точке $q_1=0$. Положение равновесия находится в точке a . При малых отклонениях q_2 атома 2 из положения равновесия фактический потенциал (—) с хорошей точностью можно аппроксимировать параболой $Vq) = \text{const } q_2^2$. Тем самым оправдывается наше предположение относительно упругих сил.

где N — число атомов в цепочке. Для решения уравнения (7.2) мы предположим заранее, что колебательные состояния цепочки можно описать плоскими волнами. Введем следующую зависимость отклонения $q_l(t)$ от координаты l :

$$q_l(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{iwl a} B_w(t), \quad (7.4)$$

где w — действительное волновое число¹⁾, которое в силу (7.3) имеет следующий вид:

$$w = \frac{2\pi n}{Na^3} \quad (7.4a)$$

n — целое число, удовлетворяющее условию $-N/2 \leq n < N/2$.

Множитель $1/\sqrt{N}$ отвечает за нормировку в следующем смысле:

$$\sum_{l=1}^N \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{iwl a} \right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{iwl a} \right) = 1. \quad (7.4б)$$

Далее, функции $1/(\sqrt{N})e^{iwl a}$ взаимно ортогональны:

$$\sum_{l=1}^N \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{iwl a} \right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{iwl' a} \right) = 0 \quad \text{для } w \neq w' \quad (7.4в)$$

(см. задание 1 в конце этого параграфа). В обоих случаях суммирование распространяется на все атомы цепочки. Коэффициент B_w в предполагаемом виде решения (7.4) имеет смысл амплитуды, зависящей от волнового числа w и времени t . Для того чтобы определить зависимость амплитуды B_w от времени, подставим решение (7.4) в уравнение (7.2), откуда непосредственно получаем уравнение

$$\ddot{B}_w(t) = g(e^{iwa} + e^{-iwa} - 2)B_w(t), \quad (7.5)$$

где введено следующее краткое обозначение:

$$g = \frac{K}{M}. \quad (7.6)$$

Уравнение (7.5) представляет собой простое уравнение колебания для зависящей от времени функции B_w . Для его решения сделаем обычную экспоненциальную подстановку

$$B_w(t) = e^{-i\omega_w t} A_w. \quad (7.7)$$

¹⁾ В литературе вместо этой буквы часто применяются буквы k и q , причем последнее обозначение часто является поводом к недоразумению, поскольку буквой q одновременно обозначают и отклонение.

После подстановки (7.7) в (7.5) получаем связь между частотой ω и волновым числом w :

$$-\omega_w^2 = g(e^{iwa} + e^{-iwa} - 2) = 2g(\cos wa - 1), \quad (7.8)$$

или, после элементарных преобразований,

$$\omega = 2\sqrt{g} |\sin(wa/2)|. \quad (7.9)$$

Это выражение представляет собой закон дисперсии для распространения волны по линейной цепочке.

Зависимость ω от w , т. е. закон дисперсии, представлена на рис. 18. Поскольку в случае уравнения (7.2) речь идет о линейном уравнении, можно использовать принцип суперпозиции, согласно которому сумма решений (7.4) с амплитудами (7.7) также является решением. Запишем это решение в виде

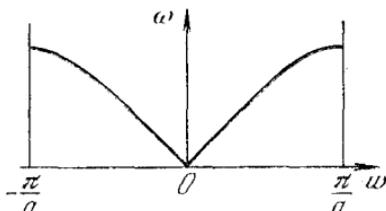


Рис. 18. Закон дисперсии для линейной атомной цепочки.

$$q_l(t) = \sum_w \left(\frac{1}{\sqrt{N}} e^{iwl a} e^{-i\omega_w t} A_w + \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-iwl a} e^{i\omega_w t} A_w^* \right). \quad (7.10)$$

При этом мы учли, что комплексно сопряженная решению (7.4) функция также является решением уравнения (7.2), а амплитуда $q_l(t)$ должна быть действительной величиной.

Суммирование проводится по всем разрешенным условиям (7.4а) значениям w . Коэффициенты A_w и A_w^* определяются начальными условиями, т. е. начальными положениями $q_l(0)$ и начальными скоростями $\dot{q}_l(0)$ отдельных атомов. Теперь мы займемся более подробно формальным рассмотрением этой проблемы и сформулируем ее еще раз с помощью функции Лагранжа и уравнений Гамильтона. Как известно, функция Лагранжа определяется выражением $L = T - V$, где T — кинетическая, а V — потенциальная энергии. В нашем случае кинетическая энергия равна сумме вкладов отдельных атомов

$$T = \sum_{l=1}^N \frac{M}{2} \dot{q}_l^2, \quad (7.11)$$

а потенциальная энергия может быть определена с помощью уравнения

$$K_l = -\text{grad}_{q_l} V \quad (7.12)$$

и приводится элементарным образом к следующему виду:

$$V = \frac{1}{2} K \sum_{l=1}^N (q_l - q_{l+1})^2. \quad (7.13)$$

В последующем изложении для краткости мы обозначим $\sum_{i=1}^N$ через \sum_l . Уравнения Лагранжа, как обычно, имеют вид

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} - \frac{\partial L}{\partial q_l} = 0. \quad (7.14)$$

После подстановки (7.11) и (7.13) в (7.14) мы вновь получаем уравнение движения (7.2). Для последующего изложения запишем еще выражение для канонически сопряженного импульса, который, как известно, равен производной L по \dot{q}_l :

$$p_l = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} = M \dot{q}_l. \quad (7.15)$$

Посмотрим, далее, как выглядит функция Гамильтона, определяемая выражением $H = T + V$. Как известно, она следующим образом связана с функцией Лагранжа:

$$H = \sum_l p_l \dot{q}_l - L. \quad (7.16)$$

Функция Гамильтона с учетом (7.11), (7.13) и (7.15) принимает вид

$$H = \sum_l \frac{p_l^2}{2M} + \frac{1}{2} K \sum_l (q_l - q_{l+1})^2. \quad (7.17)$$

Соответствующие уравнения Гамильтона, как обычно, выглядят следующим образом:

$$\dot{q}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l}, \quad \dot{p}_l = - \frac{\partial H}{\partial q_l} \quad (7.18)$$

и с учетом (7.17) принимают следующий явный вид:

$$\dot{q}_l = \frac{1}{M} p_l, \quad \dot{p}_l = K (q_{l+1} + q_{l-1} - 2q_l). \quad (7.19)$$

Зададимся теперь вопросом, как будет выглядеть функция Гамильтона, если мы перейдем от отклонений q_l отдельных атомов к новым «координатам», а именно, к амплитудам A_w , A_w^* . При этом наряду с выражением (7.10) мы должны также рассмотреть выражение для канонически сопряженного импульса. Диф-

ференцируя правую часть (7.10) по времени и умножая результат на M , получим, согласно (7.15), следующее выражение для канонически сопряженного импульса $p_l(t)$:

$$p_l(t) = \sum_w \left(-i\omega_w M \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\omega_l t} e^{-i\omega_w t} A_w + i\omega_w M \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\omega_l t} e^{i\omega_w t} A_w^* \right). \quad (7.20)$$

Теперь выразим функцию Гамильтона через амплитуды A_w и A_w^* , что обеспечит нам позже непосредственный переход к квантованию. Вычисляя выражение для кинетической энергии, вначале получаем

$$\frac{1}{2M} \sum_l p_l^2 = \frac{1}{2M} \sum_l \left(\sum_w -i\omega_w M \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\omega_l t} B_w(t) + \right. \\ \left. + \text{компл. сопряж.} \right)^2. \quad (7.21)$$

В (7.21) присутствуют выражения вида

$$\sum_w \sum_{w'} (-i\omega_w M)(-i\omega_{w'} M) B_w(t) B_{w'}(t) \underbrace{\frac{1}{N} \sum_l e^{i\omega_l t + i\omega_{l'} t}}_{\delta_{w,-w'}}. \quad (7.22)$$

Последняя сумма, ввиду ортогональности дискретных волновых амплитуд $e^{i\omega_l t}$, является символом Кронекера. Другие квадратичные и билинейные по B выражения также упрощаются, так что после кратких промежуточных вычислений вместо (7.21) находим

$$\frac{1}{2M} \sum_l p_l^2 = \frac{M}{2} \sum_l \left(-\omega_w \omega_{-w} B_w(t) B_{-w}(t) - \right. \\ \left. - \omega_w \omega_{-w} B_w^*(t) B_{-w}^*(t) + \omega_w^2 B_w(t) B_w^*(t) + \right. \\ \left. + \omega_w^2 B_w^*(t) B_w(t) \right). \quad (7.23)$$

Рассмотрим выражение для потенциальной энергии

$$V = \frac{K}{2} \sum_l (q_l^2 + q_{l+1}^2 - 2(q_l q_{l+1})) \quad (7.24)$$

более обстоятельно, для чего разложим его на три различные части:

$$\underbrace{K \sum_l q_l^2}_{V_1} - \underbrace{\frac{K}{2} \sum_l q_{l-1} q_l}_{V_2} - \underbrace{\frac{K}{2} \sum_l q_{l+1} q_l}_{V_3}. \quad (7.25)$$

Используя ортогональность волновых амплитуд $e^{i\omega_l t}$ (см. (7.22)), после элементарных преобразований получаем следующие

выражения для V_1, V_2, V_3 :

$$V_1 = K \sum_w (B_w(t) B_{-w}(t) + B_w^*(t) B_{-w}^*(t) + B_w(t) B_w^*(t) + B_w^*(t) B_w(t)), \quad (7.26)$$

$$V_2 = \frac{K}{2} \sum_w (B_w(t) B_{-w}(t) e^{-i\omega w} + \text{к. с.} + B_w(t) B_w^*(t) e^{-i\omega a} + B_w^*(t) B_w(t) e^{i\omega a}), \quad (7.27)$$

$$V_3 = \frac{K}{2} \sum_w (B_w(t) B_{-w}(t) e^{i\omega a} + \text{к. с.} + B_w(t) B_w^*(t) e^{i\omega a} + B_w^*(t) B_w(t) e^{-i\omega a}). \quad (7.28)$$

Рассмотрим выражение для полной энергии $T + V$ и сгруппируем отдельные члены. При этом учтем, что согласно (7.8) $\omega_w = \omega_{-w}$. Далее оказывается, что множители выражений $B_w(t) B_{-w}(t)$ принимают вид

$$-\frac{M}{2} \omega_w^2 + K - K \cos \omega a = 0 \quad (7.29)$$

и согласно закону дисперсии (7.8) исчезают. Равным образом исчезают множители выражений $B_w(t) B_{-w}^*(t)$. Множители членов $B_w(t) B_w(t)$ объединяются в выражения следующего вида:

$$\frac{M}{2} \omega_w^2 + K - K \cos \omega a = M \omega_w^2 \quad (7.30)$$

и также в силу закона дисперсии не исчезают.

Таким образом, для H мы получаем следующее выражение:

$$H = \sum_w M \omega_w^2 \{B_w^*(t) B_w(t) + B_w(t) B_w^*(t)\}. \quad (7.31)$$

Имея в виду последующее квантовое теоретическое рассмотрение, мы (не указывая до сих пор на это определенно) на всех этапах получения H очень тщательно следили за *порядком следования амплитуд B^* и B* . Этот порядок отражен также в (7.31).

Поскольку B имеет размерность длины, введем новые безразмерные величины, причем, принимая во внимание последующее квантовое рассмотрение, выберем соответствующий *новый нормировочный множитель*. Итак, положим

$$B_w(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_w}} b_w. \quad (7.32)$$

Тогда функция Гамильтона, выраженная через новые амплитуды, принимает следующий вид:

$$H = \sum_w \hbar \omega_w \frac{1}{2} (b_w^* b_w + b_w b_w^*). \quad (7.33)$$

Задания к § 7

1. Показать, что в силу (7.3) волновое число w должно иметь вид (7.4а). Доказать (7.4б) и (7.4в).

Указание. Наряду с (7.4а) использовать формулу $\sum_{l=1}^N d^l = \frac{1-d^{N+1}}{1-d}$.

2. Пусть заданы начальные положения атомов $q_l(0)$ и начальные скорости $\dot{q}_l(0)$. Какой вид имеет решение $q_l(t)$ для последующих моментов времени? Более подробно обсудить следующие частные случаи:

а) $q_l(0) = A \sin(w_0 l a)$, $\dot{q}_l(0) = 0$;

б) $q_l(0) = q_0 \delta_{l,l_0}$, $\dot{q}_l(0) = 0$.

Указание. Коэффициенты при $t=0$ в (7.10) определяются с помощью фурье-преобразования. Для читателя, незнакомого с преобразованием Фурье: умножить обе части (7.10) и (7.20) на $e^{-i w_0 l a}$ ($w_0 \geq 0$) и просуммировать по l . В силу (7.4в), суммы по w в правых частях (7.10) и (7.20) выпадают, так что A_{w_0} , $A_{w_0}^*$ выражаются прямо через суммы по q_l и \dot{q}_l .

3. На каждый атом l исследованной в предыдущих параграфах атомной цепочки дополнительно воздействует зависящая от времени внешняя сила $K_l(t)$, которая может меняться от атома к атому. Какой вид имеют:

а) уравнения движения (вместо (7.2)),

б) потенциальная энергия (вместо (7.13)),

в) функция Лагранжа $L = T - V$,

г) функция Гамильтона H (вместо (7.17))

как функции $K_l(t)$ и $q_l(t)$?

Как выглядят имеющиеся в случаях б), в), г) дополнительные члены, если их разложить по функциям (7.4)?

4. Вычислить $q_l(t)$ в специальном случае, когда указанная в задании 3 сила имеет вид $K_l(t) = K_0 \delta_{l,l_0} \sin \omega_0 t$. Начальные условия суть $q_l(0) = \dot{q}_l(0) = 0$.

5. В линейной атомной цепочке с «упругим» взаимодействием между ближайшими соседями массы атомов попеременно раз-

личны: M для l четных и m для l нечетных (рис. 19). Вывести уравнение движения и решить его подстановкой

$$q_l(t) = \begin{cases} Ae^{i\omega l a} e^{-i\omega t} & \text{для } l \text{ четного,} \\ Be^{i\omega l a} e^{-i\omega t} & \text{для } l \text{ нечетного.} \end{cases}$$

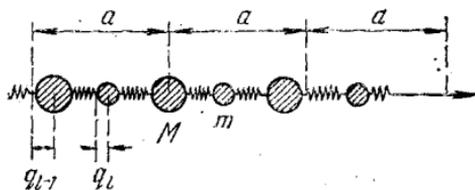


Рис. 19. Двухатомная линейная цепочка (к заданию 5).

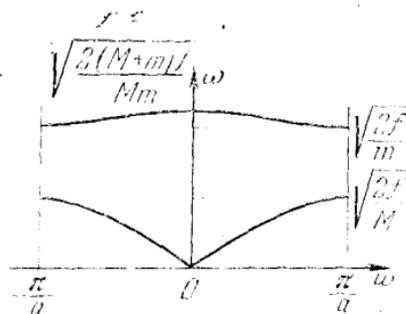


Рис. 20. Закон дисперсии для двухатомной линейной цепочки. f — упругая постоянная.

Убедиться в том, что закон дисперсии имеет вид, показанный на рис. 20.

§ 8. Линейная атомная цепочка: квантовомеханическое рассмотрение. Фононы

В рамках механики точки нам хорошо известно, каким образом мы могли бы перейти от классического описания к квантовомеханическому рассмотрению. Если у нас есть система точечных масс, которые описываются координатами от q_1 до q_N и соответствующими каноническими импульсами от p_1 до p_N , то, потребовав выполнения для этих координат и импульсов перестановочного соотношения

$$p_n q_l - q_l p_n = \frac{\hbar}{i} \delta_{ln}, \quad (8.1)$$

мы перейдем к квантованию. Причем координаты, а также импульсы различных точек между собой коммутируют:

$$q_l q_n - q_n q_l = 0, \quad (8.2)$$

$$p_n p_l - p_l p_n = 0. \quad (8.3)$$

Этот рецепт квантования можно применить к атомной цепочке, которую мы рассматривали в предыдущих параграфах, поскольку составляющие ее отдельные точечные массы могут быть охарактеризованы своими координатами и импульсами. Однако мы видели, что вместо координат q_l и p_l целесообразнее использовать новые координаты B_ω и B_ω^* , которые имеют наглядный смысл

амплитуд. Поскольку эти вторые координаты связаны с координатами q_l и p_l посредством линейного преобразования (7.10) или (7.20), то из перестановочных соотношений (8.1—8.3) следуют, естественно, новые перестановочные соотношения для B_w , B_w^* . Из эквивалентного (7.10) выражения для $q_l(t)$ (см. (7.7)):

$$q_l = \sum_w \frac{1}{\sqrt{N}} e^{iwtl} \{B_w + B_{-w}^*\} \quad (8.4)$$

следует после применения преобразования Фурье (см. указание к заданию 2 § 7), что

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-iwtl} q_l = B_w + B_{-w}^* \equiv \alpha_w, \quad (8.5)$$

причем последнее равенство представляет собой новое сокращенное обозначение. Аналогичным образом, с помощью преобразования Фурье находим импульсы

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-iwtl} p_l = -i\omega_w M B_w + i\omega_{-w} B_{-w}^* M = \beta_w M \omega_w. \quad (8.6)$$

В уравнениях (8.4), (8.5), (8.6) аргумент t у всех «переменных» q_l , p_l , B_w , B_{-w} опущен. Основанием для этого служит то обстоятельство, что при квантовании, которое ведет к уравнению Шредингера, зависящие от времени измеримые величины (как, например, координаты $q(t)$) становятся независимыми от времени операторами.

Из двух последних уравнений (8.5) и (8.6), решая их относительно B_w и B_{-w}^* , получаем соотношения

$$B_w = \frac{1}{2} (\alpha_w + i\beta_w) \quad (8.7)$$

и

$$B_{-w}^* = \frac{1}{2} (\alpha_w - i\beta_w). \quad (8.8)$$

Исследуем теперь, какой вид имеют перестановочные соотношения между операторами B_w и B_w^* , относящимися к одному и тому же моменту времени. Для этого образуем коммутатор

$$B_w B_w^* - B_w^* B_w = \frac{1}{4} \{(\alpha_w + i\beta_w)(\alpha_{-w'} - i\beta_{-w'}) - (\alpha_{-w'} - i\beta_{-w'})(\alpha_w + i\beta_w)\}. \quad (8.9)$$

Перемножим стоящие в правой части (8.9) скобки, соблюдая при этом порядок сомножителей, и соберем вместе выражения,

представляющие собой коммутаторы $[A, B] = AB - BA$:

$$(8.9) = \frac{1}{4} \{ [\alpha_w, \alpha_{-w'}] + [\beta_w, \beta_{-w'}] + i[\beta_w, \alpha_{-w'}] - i[\alpha_w, \beta_{-w'}] \}. \quad (8.10)$$

Выразим каждый коммутатор через коммутаторы для q_l и p_l , используя при этом (8.5) и (8.6). Поскольку α_w состоит только из q_l (см. (8.5)), а все операторы q_l коммутируют друг с другом, отсюда немедленно следует, что $[\alpha_w, \alpha_{-w'}] = 0$. Аналогично, оказывается, что $[\beta_w, \beta_{-w'}] = 0$. В оставшееся в (8.10) выражение

$$\frac{1}{4} \{ i[\beta_{-w'}, \alpha_w] + i[\beta_w, \alpha_{-w'}] \} \quad (8.11)$$

подставим явные выражения (8.5) и (8.6), после чего получим

$$\frac{i}{4N} \left\{ \frac{1}{M\omega} \sum_{l'=1}^N e^{+iw'l'a} \sum_{l=1}^N e^{-iwla} \underbrace{[p_{l'}, q_l]}_{\frac{\hbar}{i}\delta_{ll'}} + (w \leftrightarrow -w') \right\}. \quad (8.12)$$

Согласно перестановочному соотношению (8.1), выражение (8.12) переходит в

$$\frac{i}{4M\omega} \sum_{l=1}^N \frac{1}{N} e^{iia(w'-w)} \frac{\hbar}{i} \cdot 2 = \frac{\hbar}{2M\omega} \delta_{w,w'}, \quad (8.13)$$

так что мы получаем перестановочные соотношения следующего вида:

$$B_w B_{w'}^* - B_{w'}^* B_w = \frac{\hbar}{2M\omega} \delta_{w,w'}. \quad (8.14)$$

Введем теперь вместо амплитуд B_w и B_w^* согласно (7.32) новые безразмерные амплитуды b_w и b_w^+ . Тогда получим окончательно следующие перестановочные соотношения:

$$\left\{ \begin{array}{l} b_w b_{w'}^+ - b_{w'}^+ b_w = \delta_{w,w'}. \end{array} \right. \quad (8.15)$$

Если мы будем исходить из перестановочных соотношений (8.2) и (8.3), то с помощью совершенно аналогичных преобразований получим следующие перестановочные соотношения:

$$\left\{ \begin{array}{l} b_w b_{w'} - b_{w'} b_w = 0, \end{array} \right. \quad (8.16)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} b_w^+ b_{w'}^+ - b_{w'}^+ b_w^+ = 0. \end{array} \right. \quad (8.17)$$

Наряду с перестановочными соотношениями нас интересует, конечно, явный вид оператора Гамильтона в новых операторах b_w и b_w^+ . Мы можем получить его, однако, непосредственно из уравнения (7.33) § 7. Там были сделаны аналогичные только что

проведенным преобразованием от первоначальных координат q_l и импульсов p_l к новым величинам b_w, b_w^+ , поэтому формально для оператора Гамильтона будет справедлив тот же самый результат, только при всех преобразованиях мы должны строго следить за порядком следования операторов, что, однако, делалось уже тогда. Итак, перенесем сюда результат (7.33) и, преобразуя второй член в сумме по w с помощью перестановочного соотношения (8.15), получим

$$H = \sum_w \hbar \omega_w b_w^+ b_w + \frac{1}{2} \sum_w \hbar \omega_w. \quad (8.18)$$

Вторая сумма представляет собой энергию нулевых колебаний и может, при соответствующем выборе начала отсчета энергии, быть опущена. Итак, уравнение Шредингера для атомной цепочки принимает окончательно следующий вид:

$$\left(\sum_w \hbar \omega_w b_w^+ b_w \right) \Phi = E \Phi. \quad (8.19)$$

Функции, являющиеся решением этого уравнения, и собственные значения энергии мы ввели в § 3, так что мы сразу же можем использовать здесь полученные там результаты.

Для ясности и удобства использования в приложениях приведем явный вид зависимости между оператором отклонения q_l и операторами b_w, b_w^+ (см. (8.4) и (7.32)):

$$\begin{aligned} q_l(t) &= \sum_w \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_w}} (b_w + b_{-w}^+) e^{i\omega_w t}, \\ p_l(t) &= -i \sum_w \sqrt{\frac{\hbar M \omega_w}{2N}} (b_w - b_{-w}^+) e^{i\omega_w t}, \end{aligned} \quad (8.20)$$

$$\begin{aligned} b_w &= \sum_l \left\{ \sqrt{\frac{M \omega_w}{2\hbar N}} q_l + i \sqrt{\frac{1}{2\hbar M \omega_w N}} p_l \right\} e^{-i\omega_w t}, \\ b_w^+ &= \sum_l \left\{ \sqrt{\frac{M \omega_w}{2\hbar N}} q_l - i \sqrt{\frac{1}{2\hbar M \omega_w N}} p_l \right\} e^{i\omega_w t} \end{aligned} \quad (\omega_w = \omega_{-w}). \quad (8.21)$$

Принимая во внимание разложение (8.20), решение (8.19) можно интерпретировать следующим образом: в стационарном состоянии волны решетки с волновым числом w заняты n_w частицами, так называемыми *фононами*.

Такое представление в литературе иногда подчеркивается слишком сильно; в действительности при процессах в решетке

возникает наложение состояний с различными *фононными числами*. Мы будем постоянно встречаться с такого рода случаями.

В заключение мы укажем на еще одно существенное различие между классическим и квантовомеханическим рассмотрением, которое часто доставляет неприятности не только начинающим. Оно состоит в том, что начальные условия в этих случаях устанавливаются совершенно различно: в классическом случае они задаются просто с помощью $q_i(0)$ и $\dot{q}_i(0)$. Теперь, однако, q_i и p_i являются операторами! Полное начальное состояние в квантовомеханическом подходе устанавливается заданием волновой функции Φ (см. нижеследующие задания).

Задания к § 8

1. Вычислить для рассмотренной в § 8 линейной цепочки $\langle \Phi | q_i | \Phi \rangle$ и $\langle \Phi | p_i | \Phi \rangle$:

а) для $\Phi = \Phi_0$ и $\Phi = \prod_w \frac{1}{\sqrt{n_w!}} (b_w^+)^{n_w} \Phi_0$, т. е. для энергетических состояний (8.19);

б) для когерентного состояния

$$\Phi = e^{-(1/2)|\beta|^2} e^{\beta b_w^+} \Phi_0, \quad \text{причем} \quad \beta = \gamma e^{-i\omega_w t}.$$

Убедиться, что Φ является решением *зависящего от времени* уравнения Шредингера (8.19) (см. задания к § 3 и § 5).

Указание. Использовать (8.20), (4.28—4.30), а также задание 3 к § 5.

2. Вычислить $\langle \Phi | q_i^2 | \Phi \rangle$: а) для $\Phi = \Phi_0$; б) для $\Phi = b_{w_0}^+ \Phi_0$.

3. Является ли волновая функция Φ однозначно определенной (для всех l), если заданы средние значения координат и импульсов

$$\bar{q}_i = \langle \Phi | q_i | \Phi \rangle \quad \text{и} \quad \bar{p}_i = \langle \Phi | p_i | \Phi \rangle?$$

4. В квантованной атомной цепочке в положении l_0 находится дополнительный заряд, который действует с независимой от времени силой K_{l-l_0} на точечные массы $l \neq l_0$. Используя задание 3 к § 7, показать, что уравнение Шредингера в этом случае имеет вид

$$\sum (\hbar\omega_w b_w^+ b_w + g_w b_w^+ + g_w^* b_w) \Phi = E\Phi. \quad (\text{A8.1})$$

Как зависят g_w, g_w^* от K_{l-l_0} ?

Определить Φ для наимизшего энергетического состояния E_0 и найти зависимость последнего от g_w, g_w^* , а затем и от K_{l-l_0} . Энергия E_0 называется *собственной энергией* дополнительного заряда. Какова величина $\langle \Phi | q_l | \Phi \rangle$?

§ 9. Переход к континууму: классическое рассмотрение

Когда мы говорим о поле в обычном смысле этого слова, мы представляем себе, что в каждой его точке задано отклонение или возбуждение, как, например, в случае колеблющейся струны — поперечное отклонение u или для электрического поля — напряженность электрического поля E . Непосредственная задача квантовой теории поля состоит поэтому в том, чтобы проквантовать эти и подобные им величины, которые в классической интерпретации являются функциями непрерывной переменной. Для проведения этого квантования было бы естественно, исходя из уже известного квантования дискретной системы точек, проследить, как происходит переход к континууму*). Для этого нам послужит пример нашей линейной атомной цепочки. Выполним вначале предельный переход к континууму для цепочки в рамках классической физики. Будем считать что длина цепочки атомов L фиксирована, но мы размещаем в цепочке все большее число атомов N со все меньшим расстоянием a между ними. Рассмотрим следующий предельный переход:

$$\alpha \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty, \quad L = aN \text{ — конечна.} \quad (9.1)$$

Введем теперь вместо дискретных переменных l переменную $la = x$;

$$la = x; \quad (9.2)$$

при этом будем помнить, что x позднее станет непрерывно изменяющейся координатой. Одновременно введем новую амплитуду, которая зависит теперь не от дискретной переменной l , а от непрерывной переменной x . Используем, далее, соотношения

$$\Delta x = a\Delta l, \quad \Delta l = 1. \quad (9.3)$$

Запишем теперь выведенное ранее уравнение

$$M\ddot{q}_l(t) = K(q_{l+1} + q_{l-1} - 2q_l) \quad (9.4)$$

в непрерывных переменных. Поскольку мы полагаем «1» малой по сравнению с l , а q рассматриваем как непрерывно изменяющуюся переменную аргумента l , мы можем разложить правую

*) Мы сохраняем при переводе термин «континуум», под которым в книге понимается и непрерывная среда, и непрерывный случай, и т. д., поскольку в каждом конкретном случае точный смысл этого термина легко устанавливается из контекста. (Прим. перев.)

часть (9.4) в ряд Тейлора. Если использовать затем (9.2) и (9.3), а также

$$M = \rho a, \quad (9.5)$$

то уравнение (9.4) принимает вид

$$\rho a \ddot{q}(x, t) = K a^2 \frac{\partial^2 q(x, t)}{\partial x^2}. \quad (9.6)$$

Из механики известно, что величина константы упругости удваивается, если длина пружины уменьшается вдвое. Отсюда кажется естественным также и в нашем предельном переходе $a \rightarrow 0$ произведение Ka считать постоянным и ввести константу связи g согласно выражению

$$Ka = g \text{ — конечна!} \quad (9.7)$$

Тогда чисто формальным образом мы получаем уравнение

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \ddot{q}(x, t) = g \frac{\partial^2 q(x, t)}{\partial x^2}, \end{array} \right. \quad (9.8)$$

которое, естественно, напоминает обычное уравнение струны, хотя следует помнить, что в случае струны q означает поперечное смещение, здесь же оно является продольным смещением. Мы не будем углубляться в это различие, а будем основываться на формальной аналогии с дискретной цепочкой, которая поможет нам квантовать это уравнение. Прежде всего мы исследуем решения (9.8). Для этого представим q в виде

$$q(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{iwx} B_w(t). \quad (9.9)$$

Подставляя (9.9) в (9.8), получаем уравнение

$$\rho \ddot{B}_w(t) = -w^2 g B_w(t). \quad (9.10)$$

Поскольку смещение $q(x, t)$, так же как и $q_i(t)$ в дискретном случае, должно удовлетворять циклическим граничным условиям

$$q(x + L, t) = q(x, t),$$

то величина w в (9.9) должна иметь вид

$$w = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (9.11a)$$

причем n изменяется в бесконечных пределах. Множитель $1/\sqrt{L}$

в (9.9) отвечает за нормировку в следующем смысле:

$$\int_0^L \left(\frac{1}{\sqrt{L}} e^{iwx} \right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{L}} e^{iwx} \right) dx = 1. \quad (9.11a)$$

Для различных w, w' экспоненциальные функции взаимно ортогональны:

$$\int_0^L \left(\frac{1}{\sqrt{L}} e^{iwx} \right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{L}} e^{iw'x} \right) dx = 0, \quad w \neq w'. \quad (9.11b)$$

С помощью подстановки

$$B_w(t) = A_w e^{-i\omega_w t} \quad (9.12)$$

мы можем сразу решить уравнение (9.10), причем зависимость между ω и w дает закон дисперсии

$$\omega_w^2 = \frac{g}{\rho} w^2. \quad (9.13)$$

Общее решение уравнения (9.8) мы получим в виде суперпозиции решений (9.9). Поскольку смещение $q(x, t)$ должно быть чисто действительным, представим общее решение в виде

$$q(x, t) = \sum_w \left(\frac{1}{\sqrt{L}} e^{iwx} A_w e^{-i\omega_w t} + \text{к.с.} \right). \quad (9.14)$$

Напомним еще раз вкратце, в чем состоит наша цель. Она состоит в том, чтобы проквантовать волновое уравнение (9.8), используя аналогию с обычной механикой. В обычной механике при квантовании уравнения движения Ньютона вначале находят соответствующую функцию Лагранжа, откуда затем функцию Гамильтона с ее канонически сопряженными импульсами и координатами. Эта функция Гамильтона является исходным пунктом для квантования. Для того чтобы выполнить эту программу, мы должны определить соответствующую (9.8) функцию Лагранжа и затем функцию Гамильтона. Для случая дискретной линейной цепочки все это уже было проделано. Теперь речь идет о том, чтобы перенести полученные в § 7 результаты на случай континуума. Для этого будем исходить из функции Лагранжа

$$L = T - V \quad (9.15)$$

и рассмотрим сначала выражение для кинетической энергии

$$T = \frac{1}{2} \sum_i M \dot{q}_i^2. \quad (9.16)$$

Введя плотность массы (масса на единицу длины) ρ , перепишем,

согласно уравнению (9.5), выражение для кинетической энергии в виде

$$T = \frac{1}{2} \sum_l \rho a \dot{q}_l^2. \quad (9.17)$$

Если «постоянную решетки» a интерпретировать как dx , чем мы уже пользовались ранее, то (9.17) можно непосредственно представить в виде интеграла

$$T = \frac{1}{2} \int_0^L \rho dx (\dot{q}(x, t))^2. \quad (9.18)$$

Аналогичным образом поступим с потенциальной энергией

$$V = \frac{1}{2} K \sum_l (q_l - q_{l+1})^2. \quad (9.19)$$

Умножая и деля правую часть (9.19) на a^2 , перепишем это выражение в виде

$$V = \frac{1}{2} \sum_l \frac{Ka \cdot a}{g} \left(\frac{q_l - q_{l+1}}{a} \right)^2.$$

Снова введем краткое обозначение (9.7) и учтем, что g при предельном переходе $\alpha \rightarrow 0$ остается конечным. Далее, в континуальном пределе мы можем заменить разность на отношение дифференциалов. Тогда получаем следующее выражение для потенциальной энергии:

$$V = \frac{1}{2} g \int_0^L dx \left(\frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \right)^2. \quad (9.20)$$

Объединяя (9.18) и (9.20), получаем функцию Лагранжа в континуальном пределе

$$L = \frac{1}{2} \int_0^L \rho (\dot{q}(x, t))^2 dx - \frac{1}{2} g \int_0^L \left(\frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \right)^2 dx. \quad (9.21)$$

Каким образом можно было бы теперь получить уравнения Лагранжа и Гамильтона в континуальной формулировке? Для этого кратко напомним случай дискретных точечных масс, в котором справедливы уравнения Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} - \frac{\partial L}{\partial q_l} = 0. \quad (9.22)$$

Рассмотрим более подробно производную

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l}, \quad (9.23)$$

где проведем следующие очевидные преобразования:

$$\frac{\partial (T - V)}{\partial \dot{q}_n} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_n} \sum_l \frac{M}{2} \dot{q}_l^2 = \sum_l \frac{M}{2} \frac{\partial (\dot{q}_l^2)}{\partial \dot{q}_l} \frac{\partial \dot{q}_l}{\partial \dot{q}_n} = \sum_l M \dot{q}_l \frac{\partial \dot{q}_l}{\partial \dot{q}_n}. \quad (9.24)$$

Для дальнейшего вычисления суммы применим очевидное в дискретном случае соотношение

$$\frac{\partial \dot{q}_l}{\partial \dot{q}_n} = \delta_{l,n}, \quad (9.25)$$

где $\delta_{l,n}$ — встречавшийся уже нам ранее символ Кронекера:

$$\delta_{l,n} = \begin{cases} 1 & \text{для } l = n, \\ 0 & \text{для } l \neq n. \end{cases}$$

Отсюда окончательно получаем

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_l} = \sum_l M \dot{q}_l \delta_{l,n} = M \dot{q}_n. \quad (9.26)$$

Аналогично (9.25), имеет место также соотношение

$$\frac{\partial q_l}{\partial q_n} = \delta_{l,n}. \quad (9.27)$$

Только что примененные нами правила (9.25) и (9.27) имеют очевидный аналог в случае континуума, если вместо символа Кронекера ввести δ -функцию Дирака $\delta(x - x')$. Эта функция определяется только под интегралом и обладает для каждой непрерывной функции $f(x)$ следующим свойством:

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x') dx = f(x') \quad (a < x' < b). \quad (9.28)$$

Так же как $\delta_{l,n}$ в сумме по l выделяет члены с $l = n$, функция $\delta(x - x')$ выделяет под интегралом значение подынтегральной функции при $x = x'$. Эта δ -функция имеет в квантовой теории поля важное значение. Не знакомому с ее свойствами читателю мы рекомендуем прорешать задания 3—5 в конце этого параграфа.

Определим производные переменных в случае континуума следующим образом:

$$\left| \begin{array}{l} \frac{\delta q(x)}{\delta q(x')} = \delta(x - x'), \quad \frac{\delta \dot{q}(x)}{\delta \dot{q}(x')} = \delta(x - x'). \end{array} \right. \quad (9.29)$$

Далее для этих новых производных справедливо правило дифференцирования сложной функции

$$\left| \frac{\delta f(q(x))}{\delta q(x')} = \frac{\partial f(q(x))}{\partial q(x)} \frac{\delta q(x)}{\delta q(x')} \right. \quad (9.30)$$

Наконец, следует подумать о том, что означает выражение

$$\frac{\delta}{\delta q(x')} \frac{\partial q(x)}{\partial x}, \quad (9.31)$$

в котором производную $dq(x)/dx$ мы будем рассматривать как отношение дифференциалов. Используя (9.29), получаем затем следующие очевидные преобразования (при $dx \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta q(x')} \frac{q(x+dx) - q(x)}{dx} &= \frac{1}{dx} (\delta(x+dx - x') - \\ &- \delta(x - x')) = \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (9.32)$$

Теперь рассмотрим производную L по $\delta \dot{q}$ в континууме. По определению L получаем непосредственно

$$\frac{\delta L}{\delta \dot{q}(x')} = \frac{\delta}{\delta \dot{q}(x')} (T - V). \quad (9.33)$$

Поскольку V не зависит от \dot{q} , при последующих преобразованиях этот член можно опустить. По аналогии с преобразованиями (9.24) можно предположить, что операции дифференцирования по q и интегрирования можно поменять местами. Используя правило (9.30), после преобразований выражения (9.33) получаем выражение ¹⁾

$$\frac{\delta}{\delta \dot{q}(x')} \int \frac{\rho}{2} dx (\dot{q}(x))^2 = \int \rho dx \dot{q}(x) \frac{\delta \dot{q}(x)}{\delta \dot{q}(x')}, \quad (9.34)$$

которое после использования (9.29) приводит, наконец, к следующему результату:

$$(9.34) = \int \rho dx \dot{q}(x) \delta(x - x') = \rho \dot{q}(x'). \quad (9.35)$$

¹⁾ Читатель, знакомый с вариационным исчислением, сразу установит, что символ δ означает не что иное, как вариационную производную, которая появляется, например, при формулировке принципа наименьшего действия Гамильтона. В этой связи очень важно по возможности отчетливо выявить аналогию с механикой дискретных точечных масс.

Полученные выше результаты позволяют ввести в континууме канонически сопряженный импульс, для чего мы заменим известное из механики точки правило (см. § 2)

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (9.36)$$

на следующее:

$$\left| \pi(x') = \frac{\delta L}{\delta \dot{q}(x')} = \rho \dot{q}(x'), \quad (9.37) \right.$$

которое и определяет канонически сопряженный $q(x')$ импульс $\pi(x')$. Если теперь рассмотреть вариационную производную L по координате, то сразу получим, используя правило (9.30) и правило дифференцирования (9.31), соотношения

$$\frac{\delta L}{\delta q(x')} = \frac{\delta}{\delta q(x')} - \frac{g}{2} \int dx \left(\frac{\partial q(x)}{\partial x} \right)^2 = - \frac{g}{2} \int dx \frac{\delta \left(\frac{\partial q(x)}{\partial x} \right)^2}{\delta \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)} \frac{\delta \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)}{\delta q(x')}. \quad (9.38)$$

После проведения интегрирования по частям и использования (9.32) последнее выражение следующим образом преобразуется к конечному результату:

$$\begin{aligned} -g \int dx \frac{\partial q(x)}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x-x') &= g \int dx \frac{\partial^2 q(x)}{\partial x^2} \delta(x-x') = \\ &= g \frac{\partial^2 q(x')}{\partial x'^2}. \end{aligned} \quad (9.39)$$

Полученные только что результаты позволяют перенести уравнение Лагранжа (9.22) на случай континуума, если в качестве исходного выбрать уравнение

$$\left| \frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{q}(x)} - \frac{\delta L}{\delta q(x)} = 0. \quad (9.40) \right.$$

Используя результаты (9.39) и (9.35), мы вновь получаем уравнение движения для континуума:

$$\rho \ddot{q}(x, t) - g \frac{\partial^2 q(x, t)}{\partial x^2} = 0. \quad (9.41)$$

Сравнение (9.41) с уравнением движения (9.8) показывает, что (9.41) и (9.8) тождественно совпадают. Это является очевидным доказательством того, что проведенная выше процедура действительно позволяет перенести концепцию функции Лагранжа и соответствующих уравнений движения Лагранжа на случай континуума.

Обратимся теперь к соответствующему переходу для функции Гамильтона и уравнений Гамильтона. В случае дискретных точечных масс нам известны соотношения (9.36) и

$$H = \sum_l p_l \dot{q}_l - L. \quad (9.42)$$

Они позволяют получить из функции Лагранжа канонически сопряженный импульс и функцию Гамильтона. Применяя определения (9.37) и явный результат (9.35), получаем

$$\pi(x) = \frac{\delta L}{\delta \dot{q}(x)} = \rho \dot{q}(x), \quad (9.43)$$

или

$$\dot{q}(x) = \frac{\pi(x)}{\rho}. \quad (9.44)$$

Таким же образом, используя предельный переход к континууму, получаем в (9.42) общую связь между функциями Гамильтона и Лагранжа:

$$H = \int \dot{q}(x) \pi(x) dx - L. \quad (9.45)$$

Если теперь ввести в выражение (9.45) для функции Гамильтона канонически сопряженный координате q импульс согласно (9.44), а для L выражение (9.21), то почти непосредственно получим функцию Гамильтона для континуума (колеблющаяся струна):

$$H = \frac{1}{2\rho} \int_0^L \pi^2(x) dx + \frac{g}{2} \int_0^L dx \left(\frac{\partial q(x)}{\partial x} \right)^2. \quad (9.46)$$

Убедимся теперь в том, что с помощью выражения (9.46) можно сформулировать уравнения Гамильтона для континуума, которые вновь ведут к (9.41). Для этого, по аналогии с механикой точки, построим уравнения Гамильтона континуума

$$\dot{q}(x) = \frac{\delta H}{\delta \pi(x)} \quad (9.47)$$

и

$$\dot{\pi}(x) = - \frac{\delta H}{\delta q(x)}. \quad (9.48)$$

Дифференцирование по $\pi(x)$ выполняется с использованием приведенных выше правил. Используя явное выражение (9.46), сразу получаем результат

$$\dot{q}(x) = \frac{1}{\rho} \pi(x). \quad (9.49)$$

Таким же образом получаем второе уравнение Гамильтона

$$g \frac{\partial^2 q(x)}{\partial x^2} = \dot{\pi}. \quad (9.50)$$

Если исключить из уравнений (9.49) и (9.50) канонически сопряженный импульс π , то получим уже хорошо известные нам уравнения движения (9.41) или (9.8). Это является, естественно, еще одним подтверждением непротиворечивости примененного здесь формализма. Результаты этих параграфов кратко можно сформулировать следующим образом: *в континууме, так же как и в механике дискретных точечных масс, можно применить формализм Лагранжа и Гамильтона, причем следует лишь заменить правила дифференцирования (9.25) и (9.27) на правила (9.29)*. Этой аналогии, как мы увидим в последующих параграфах, оказывается достаточно, чтобы провести квантование.

Задания к § 9

1. Доказать (9.11б) и (9.11в).

2. Ряд Фурье непрерывной функции. Ввести определенную в интервале $0 \leq x \leq L$ (и кусочно гладкую) функцию $f(x)$:

$$f(x) = \sum_w c_w \frac{1}{\sqrt{L}} e^{iwx}, \quad w = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (A 9.1)$$

и определить c_w .

Указание. Умножить обе стороны предыдущего уравнения на $1/\sqrt{L} \cdot e^{-i w' x}$, проинтегрировать по x от 0 до L и воспользоваться соотношениями (9.11б) и (9.11в).

Ответ:

$$c_{w'} = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L e^{-i w' x} f(x) dx. \quad (A 9.2)$$

3. Представления δ -функции. Убедиться в том, что δ -функция может быть определена с помощью следующих предельных переходов:

$$a) \quad \delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{u \rightarrow \infty} \frac{\sin ux}{x}, \quad (A 9.3)$$

$$б) \quad \delta(x) = \lim_{u \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi u}} e^{-x^2/u}. \quad (A 9.4)$$

Указание. Подставить (A 9.3) или (A 9.4) в интеграл $\int f(x) \delta(x) dx$ и рассмотреть его значение для очень большого, но конечного u . Из-за очень быстрого спада функции для $x \neq 0$ (рис. 21) функцию $f(x)$ в точке $x = 0$ можно вынести за знак

интеграла. Воспользоваться, наконец, следующими результатами ($u \neq 0$):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin ux}{x} dx = \pi, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/u^2} dx = \sqrt{\pi} u. \quad (\text{A 9.5})$$

4. Производные δ -функции. Показать:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{d\delta(x-x')}{dx} dx = - \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=x'} \quad (\text{A 9.6})$$

и вообще для n -й производной $\delta^{(n)}$ по x :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta^{(n)}(x-x') dx = (-1)^n \left. \frac{d^n f}{dx^n} \right|_{x=x'}. \quad (\text{A 9.7})$$

Указание. Вычислить интегралы по частям.

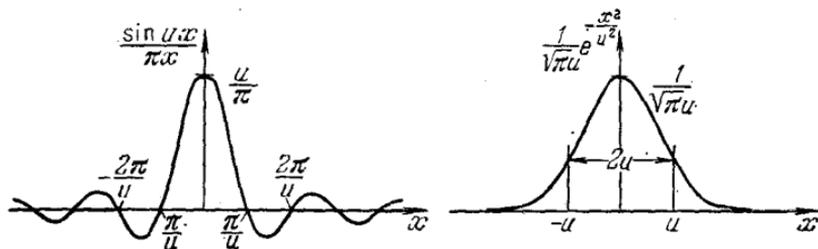


Рис. 21. Различные представления δ -функции.

5. Интеграл Фурье. Если $f(x)$ определена во всем интервале $-\infty < x < +\infty$, то от ряда Фурье (см. задание 2) следует перейти к интегралу Фурье. Положим

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c_w e^{iw x} dw. \quad (\text{A 9.8})$$

Определить c_w .

Указание. Умножить (A 9.8) на $1/(\sqrt{2\pi}) e^{-iw'x}$ и проинтегрировать в интервале $-L < x < L$, считая, что L велико, но конечно. Поменять порядок следования интегралов в правой части (A 9.8) и учесть, что

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-L}^L e^{ix(w-w')} dx = \frac{1}{\pi} \frac{\sin L(w-w')}{w-w'} \quad (\text{A 9.9})$$

для $L \rightarrow \infty$ дает δ -функцию $\delta(w-w')$.

Ответ:

$$c_{w'} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-iw'x} dx. \quad (\text{A 9.10})$$

§ 10. Переход к континууму: квантотеоретическое рассмотрение. Фононы

Результаты предыдущих параграфов позволяют непосредственно провести квантование континуума. В механике отдельных точек у нас было следующее правило квантования: координаты q_l и соответствующие канонически сопряженные импульсы p_l заменяются согласно схеме

$$\left. \begin{aligned} q_l &\rightarrow \text{оператор } q_l \\ p_l &\rightarrow \text{оператор } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_l} \end{aligned} \right\} \quad (10.1)$$

на операторы, которые удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[p_l, q_{l'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{l,l'}, \quad [p_l, p_{l'}] = 0, \quad [q_l, q_{l'}] = 0. \quad (10.2)$$

В случае континуума координатам q_l теперь соответствуют непрерывно распределенные координаты $q(x)$, а канонически сопряженным импульсам p_l соответствуют непрерывно распределенные импульсы $\pi(x)$. При этом эти новые величины зависят от непрерывной переменной — координаты x , в то время как до этого они зависели от дискретного индекса l . Как мы видели в предыдущих параграфах, при этом обычное правило дифференцирования d/dq_l заменяется на вариационную производную $\delta/\delta q(x)$. Отсюда сразу получаем соответствие

$$\left. \begin{aligned} q_l &\rightarrow q(x) \quad \text{оператор } q(x), \\ p_l &\rightarrow \pi(x) \quad \text{оператор } \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta q(x)}. \end{aligned} \right\} \quad (10.3)$$

С помощью этого соответствия можно вывести перестановочные соотношения для континуума. Для этого образуем выражение

$$\pi(x)q(x') - q(x')\pi(x) \quad (10.4)$$

и воспользуемся, согласно (10.3), явным видом оператора импульса $\pi(x)$:

$$\frac{\hbar}{i} \left\{ \frac{\delta}{\delta q(x)} q(x') - q(x') \frac{\delta}{\delta q(x)} \right\}. \quad (10.5)$$

Если теперь учесть хорошо известное из квантовой механики правило, согласно которому при применении перестановочных соотношений постоянно следует помнить, что операторы действуют на стоящую за ними волновую функцию, а затем воспользоваться соотношением (9.29) и обычным правилом дифференцирования произведения, то вместо (10.5) получаем выражение

$$\frac{\hbar}{i} \left\{ q(x') \frac{\delta}{\delta q(x)} + \delta(x-x') - q(x') \frac{\delta}{\delta q(x)} \right\}. \quad (10.6)$$

Отсюда автоматически выводится основное перестановочное соотношение для континуума:

$$\pi(x) q(x') - q(x') \pi(x) = \frac{\hbar}{i} \delta(x-x'). \quad (10.7)$$

Аналогично и так же тривиально получаются следующие перестановочные соотношения:

$$| \quad q(x)q(x') - q(x')q(x) = 0 \quad (10.8)$$

и

$$| \quad \pi(x)\pi(x') - \pi(x')\pi(x) = 0. \quad (10.9)$$

Чтобы показать, каким образом в случае континуума можно ввести операторы рождения и уничтожения, вновь обратимся к конкретному примеру линейной цепочки. Для этого будем исходить из разложения (9.14) пока еще классической величины $q(x, t)$:

$$q(x, t) = \sum_w \left(\frac{1}{\sqrt{L}} e^{iwx} B_w(t) + \text{к. с.} \right). \quad (10.10)$$

Дифференцируя это выражение по времени и умножая его на ρ , получаем

$$\pi(x, t) = \rho \dot{q} = \sum_w \left(\frac{1}{\sqrt{L}} \rho (-i\omega_w) e^{iwx} B_w(t) + \text{к. с.} \right). \quad (10.11)$$

Пусть теперь $q(x, t)$, а также $\pi(x, t)$ и тем самым неизбежно B_w , B_w^* будут операторами. По аналогии с дискретной атомной цепочкой введем новые операторы b_w и b_w^+ согласно соотношениям

$$B_w = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w}} b_w, \quad B_w^+ = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w}} b_w^+. \quad (10.12)$$

Тогда равенства (10.10) и (10.11) переходят в выражения

$$| \quad q(x) = \sum_w \frac{1}{\sqrt{L}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w}} (e^{iwx} b_w + e^{-iwx} b_w^+) \quad (10.13)$$

и

$$\left| \pi(x) = \sum_w \frac{i}{\sqrt{L}} \sqrt{\frac{\hbar \omega_w \rho}{2}} (-e^{iwx} b_w + e^{-iwx} b_w^+). \quad (10.14) \right.$$

Теперь используем все проведенные нами в § 7 преобразования, чтобы перейти в функции Гамильтона от q_l и p_l к b_w, b_w^+ . Единственное отличие по сравнению с предыдущими вычислениями состоит в том, что вместо суммы по l мы имеем интеграл по x от 0 до L и что вместо соотношения ортогональности

$$\frac{1}{N} \sum_{l=1}^N e^{iwl a - iw' l a} = \delta_{ww'} \quad \left(\text{где } w = \frac{2\pi n}{aN}, \quad n - \text{целое число} \right) \quad (10.15)$$

появляется соотношение ортогональности следующего вида:

$$\frac{1}{L} \int_0^L e^{iwx - iw'x} dx = \delta_{ww'} \quad \left(\text{где } w = \frac{2\pi n}{L}, \quad n - \text{целое число} \right). \quad (10.16)$$

Поскольку больше ничего не изменяется, мы сразу приводим оператор Гамильтона для колеблющейся атомной цепочки в предельном случае континуума к виду

$$\left| H = \sum_w \hbar \omega_w (b_w^+ b_w + 1/2) \quad (10.17) \right.$$

и предоставляем проверку этого результата сомневающемуся читателю. «Амплитуды» b_w^+ вновь, естественно, операторы. Перестановочные соотношения между операторами b_w^+, b_w также получаются совершенно аналогично § 8. Для этого мы с помощью преобразования Фурье разрешаем (10.13) и (10.14) относительно b_w, b_w^+ , образуем, например, выражение $b_w b_w^+, -b_w^+ b_w$ и подставляем сюда перестановочные соотношения (10.7 — 10.9). Детальный расчет мы предоставляем читателю в качестве задания и сразу выпишем результат

$$[b_w, b_w^+] = \delta_{w,w'}, \quad [b_w, b_{w'}] = [b_w^+, b_{w'}^+] = 0. \quad (10.18)$$

Если разложения (10.13) и (10.14) проводятся не в конечном «объеме», а во всем пространстве, то в (10.13) и (10.14) вместо рядов Фурье появляются интегралы Фурье. При этом символ Кронекера в перестановочном соотношении (10.18) следует заменить на δ -функцию $\delta(w - w')$. На этом процесс квантования полностью заканчивается. Поскольку операторы b_w, b_w^+ зависят

от дискретного индекса, дальнейшее рассмотрение проводится аналогично случаю дискретных точечных масс:

решение уравнения Шредингера

$$H\Phi = E\Phi \quad (10.19)$$

записывается в известном виде (ср. (3.48))

$$\Phi_{\{n\}} = \prod_w \frac{1}{\sqrt{n_w!}} (b_w^+)^{n_w} \Phi_0. \quad (10.20)$$

Оператор числа частиц

$$n_w = b_w^+ b_w \quad (10.21)$$

коммутирует с H . Он показывает, сколько квантов имеется в состоянии w . В случае упругой среды говорят о числе фононов, занимающих моду w .

Теперь обсудим задачу построения средних значений, например средних значений для $q(x)$ и $\pi(x)$, которые по аналогии с дискретным случаем определяются выражениями

$$\overline{q(x)} = \langle \Phi | q(x) | \Phi \rangle \quad (10.22)$$

и

$$\overline{\pi(x)} = \langle \Phi | \pi(x) | \Phi \rangle. \quad (10.23)$$

Рассмотрим несколько более подробно вычисление (10.22) и в качестве примера функции Φ выберем собственное состояние (10.20) оператора Гамильтона (10.17).

Мы утверждаем, что соответствующее среднее значение исчезает:

$$\langle \Phi_{\{n\}} | q(x) | \Phi_{\{n\}} \rangle = 0. \quad (10.24)$$

Чтобы показать это, введем в (10.24) разложение (10.13) для $q(x)$:

$$\left\langle \Phi_{\{n\}} \left| \sum_w \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w L}} (e^{iwx} b_w + e^{-iwx} b_w^+) \right| \Phi_{\{n\}} \right\rangle. \quad (10.25)$$

Поскольку суммирование не связано с вычислением среднего значения, эти операции можно поменять местами и представить (10.25) в виде

$$\begin{aligned} \sum_w \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w L}} e^{iwx} \langle \Phi_{\{n\}} | b_w | \Phi_{\{n\}} \rangle + \\ + \sum_w \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w L}} e^{-iwx} \langle \Phi_{\{n\}} | b_w^+ | \Phi_{\{n\}} \rangle. \end{aligned} \quad (10.26)$$

Заметим, что e^{iwx} также не связано с вычислением среднего зна-

чения! Таким образом, x всего лишь индекс. Вспомним § 3, где показано, что действие оператора рождения b_w^+ означает увеличение числа квантов на один, так что из $\Phi_{\{n\}}$ возникает состояние, при котором в моде оказывается одним квантом больше. Ввиду ортогональности волновых функций с разными числами заполнения справедливы соотношения

$$\langle \Phi_{\{n\}} | b_w^+ | \Phi_{\{n\}} \rangle = 0, \quad \langle \Phi_{\{n\}} | b_w | \Phi_{\{n\}} \rangle = 0. \quad (10.27)$$

Из обращения этих средних значений в нуль сразу следует справедливость соотношения (10.24). Совершенно аналогичным образом доказывается, что среднее значение канонически сопряженного импульса $\pi(x)$ также обращается в нуль. На первый взгляд этот результат кажется удивительным, поскольку и в случае колебаний континуума можно ожидать конечных амплитуд смещения. Этот результат, однако, сразу становится понятным, если вспомнить, что в квантовой механике мы имеем дело со средними значениями. В рассматриваемой ситуации любое положительное смещение $q(x)$ так же вероятно, как и отрицательное, так что в среднем они взаимно уничтожаются. Для того чтобы получить порядок величины смещения, следует рассмотреть среднеквадратичное значение амплитуды. Проведение соответствующих вычислений довольно просто, и в результате получаем

$$\overline{q^2(x)} = \sum_w \frac{1}{L} \frac{1}{2\rho\omega_w} (2n_w + 1). \quad (10.28)$$

Этот результат тем более замечателен, что даже при $n_w = 0$ (10.28) имеет отличное от нуля значение. Он означает, что осцилляторы даже в самом глубоком состоянии с конечной вероятностью имеют конечную амплитуду смещения. Аналогичный результат получается также для $\langle \pi^2 \rangle$, что означает, что импульсы также имеют конечные значения. Эти результаты являются не чем иным, как математическим выражением того обстоятельства, что квантовомеханические осцилляторы испытывают нулевые колебания. Теперь мы займемся интересным вопросом, нельзя ли с помощью подходящего выбора волновой функции достичь того, чтобы средняя амплитуда $q(x)$ также и в смысле квантовомеханического среднего была отлична от нуля. Этот вопрос приобретает важное значение в связи с квантовой оптикой. В качестве примера состояния, в котором среднее значение $q(x)$ не исчезает, рассмотрим когерентное состояние вида

$$\Phi = e^{-(1/2)|\beta|^2} e^{\beta b_w^+} \Phi_{0s}, \quad (10.29)$$

где β должно быть равно

$$\gamma e^{-i\omega_w t}. \quad (10.30)$$

Согласно упражнениям 4'к §§ 3 и 5, выражение (10.29) при β , определяемом (10.30), является решением зависящего от времени уравнения Шредингера с оператором Гамильтона (10.17) (однако без постоянной нулевой энергии $\Sigma^{1/2} \hbar \omega_w$). Подставляя (10.13) в (10.22), получаем

$$\langle \Phi | q(x) | \Phi \rangle = \sum_w \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w L}} \cdot (e^{iw_x} \langle \Phi | b_w | \Phi \rangle + e^{-iw_x} \langle \Phi | b_w^+ | \Phi \rangle), \quad (10.31)$$

причем мы вновь переставили порядок суммирования и образования среднего значения. Для вычисления выражения

$$\langle \Phi | b_w | \Phi \rangle \quad (10.32)$$

вначале рассмотрим (ср. (10.29))

$$b_w e^{\beta b_{w_0}^+} \Phi_0. \quad (10.33)$$

При $w \neq w_0$ мы можем подействовать оператором b_w прямо на Φ_0 , тогда (10.33) обратится в нуль. При $w = w_0$ пишем

$$(10.33) = (b_{w_0} e^{\beta b_{w_0}^+} - e^{\beta b_{w_0}^+} b_{w_0}) \Phi_0. \quad (10.34)$$

Перестановка $e^{\beta b_{w_0}^+}$ с b_{w_0} дает, однако (ср. основное правило (5.25)),

$$(10.33) = \beta e^{\beta b_{w_0}^+} \Phi_0. \quad (10.35)$$

Если подставить эти результаты в (10.32), то получим, поскольку Φ нормирована,

$$\langle \Phi | b_w | \Phi \rangle = \beta \delta_{w, w_0} = \gamma e^{-i\omega_{w_0} t} \delta_{w, w_0} \quad (10.36)$$

и соответственно

$$\langle \Phi | b_w^+ | \Phi \rangle = \beta^* \delta_{w, w_0} = \gamma^* e^{i\omega_{w_0} t} \delta_{w, w_0}. \quad (10.37)$$

С помощью выражений (10.36) и (10.37) для среднего значения амплитуды смещения $q(x)$ получаем

$$\langle \Phi | q(x) | \Phi \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{w_0} L}} (\beta e^{i\omega_{w_0} x} + \beta^* e^{-i\omega_{w_0} x}). \quad (10.38)$$

При $\beta = (10.30)$ и действительном γ , таким образом, для когерентного состояния в результате получается бегущая волна:

$$| \langle \Phi | q(x) | \Phi \rangle = A \cos(\omega_{w_0} x - \omega_{w_0} t), \quad (10.39)$$

где

$$A = \sqrt{\frac{2\hbar}{\rho\omega_w L}} \gamma.$$

Аналогичным образом получается выражение для среднего значения канонически сопряженного импульса:

$$\langle \Phi | \pi(x) | \Phi \rangle = A\rho\omega_w \sin(\omega_w x - \omega_w t), \quad (10.40)$$

которое можно получить прямо из (10.39) с помощью дифференцирования по времени. Этот пример отчетливо показывает, что, применяя соответствующие волновые пакеты, можно проследить распространение волн и на средних значениях. Приведенное выше рассмотрение было применено Шредингером при обсуждении проблемы гармонического осциллятора.

Задания к § 10

1. С помощью (10.13), (10.14) выразить b_w , b_w^+ через $q(x)$, $\pi(x)$.
2. Вывести (10.18) из (10.7—10.9).
3. Чем следует заменить (10.39), если γ в (10.30) комплексна? Указание. Положить $\gamma = r_0 e^{i\varphi}$.
4. Вычислить $\langle \Phi | q(x) | \Phi \rangle$ для

$$\Phi = \left\{ \prod_w \exp\left(-\frac{1}{2} |\gamma_w|^2\right) \exp(\gamma_w e^{-i\omega_w t} b_w^+) \right\} \Phi_0.$$

§ 11. Трехмерные проблемы: квантование скалярного волнового уравнения и электромагнитного поля. Фотоны

Для квантования трехмерного волнового уравнения

$$\left| \rho \frac{d^2 \varphi(\mathbf{x}, t)}{dt^2} - g \Delta \varphi = 0 \right. \quad (11.1)$$

мы применим рецепты квантования, полученные в § 10. В (11.1) \mathbf{x} — радиус-вектор с компонентами x , y , z , Δ — оператор Лапласа:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Обобщая рассуждения § 10, сразу находим функцию Лагранжа, уравнения Лагранжа для которой в случае континуума согласуются с (11.1). Запишем функцию Лагранжа в виде интеграла

$$\left| L = \int \mathcal{L}(\mathbf{x}) d^3x \right. \quad (11.2)$$

от плотности лагранжиана \mathcal{L} , которая в настоящем случае дается выражением

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \frac{\rho}{2} \dot{\varphi}^2 - \frac{g}{2} (\text{grad } \varphi)^2, \quad (11.3)$$

или, в явном виде,

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \frac{\rho}{2} \dot{\varphi}^2 - \frac{g}{2} \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \right). \quad (11.4)$$

Соответствующие уравнения Лагранжа, совершенно аналогично одномерному случаю, имеют вид

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}(\mathbf{x})} - \frac{\delta L}{\delta \varphi(\mathbf{x})} = 0. \quad (11.5)$$

Если в левую часть (11.5) подставить выражение (11.2), где $\mathcal{L}(\mathbf{x})$ задается (11.3), то после проведения дифференцирования с учетом правила (9.29) получается волновое уравнение (11.1). Канонический импульс вновь получаем в виде

$$\pi(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\varphi}(\mathbf{x})} = \rho \dot{\varphi}(\mathbf{x}). \quad (11.6)$$

Перенесение перестановочных соотношений для одномерного случая на настоящий случай можно провести без каких-либо трудностей, если заменить одномерную δ -функцию на трехмерную. Трехмерная δ -функция $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ определяется с помощью свойства

$$\int f(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3x = f(\mathbf{x}'), \quad (11.7)$$

где функция $f(\mathbf{x})$ должна быть непрерывной. Здесь и в дальнейшем изложении $\int \dots d^3x$ обозначает трехмерный интеграл $\int \int \int \dots dx dy dz$. Перестановочные соотношения приобретают вид

$$\left\{ \begin{aligned} \pi(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}') - \varphi(\mathbf{x}') \pi(\mathbf{x}) &= \frac{\hbar}{i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ \varphi(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}') - \varphi(\mathbf{x}') \varphi(\mathbf{x}) &= 0, \\ \pi(\mathbf{x}) \pi(\mathbf{x}') - \pi(\mathbf{x}') \pi(\mathbf{x}) &= 0. \end{aligned} \right. \quad (11.8)$$

Полноты ради приведем еще функцию Гамильтона, которую также можно записать в виде интеграла от плотности гамильтониана:

$$H = \int \mathcal{H}(\mathbf{x}) d^3x. \quad (11.9)$$

Плотность гамильтониана задается выражением

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\rho} \pi^2 + \frac{g}{2} (\text{grad } \varphi)^2. \quad (11.10)$$

Если аналогично одномерному случаю разложить φ и π по плоским волнам с законом дисперсии

$$\omega_w = v w, \quad v = \sqrt{\frac{g}{\rho}}, \quad (11.11)$$

т. е. представить эти величины в виде

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{w}}\rho}} (b_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} + b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}}), \\ \pi(\mathbf{x}) &= \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{w}}\rho}{2}} (-b_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} + b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}}), \end{aligned} \quad (11.12)$$

то оператор Гамильтона преобразуется к уже хорошо известному нам виду

$$H = \sum_{\mathbf{w}} \hbar\omega_{\mathbf{w}} \left(b_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} + \frac{1}{2} \right). \quad (11.13)$$

Из вида гамильтониана следует, что квантование трехмерного волнового уравнения происходит совершенно аналогично случаю одного измерения. Единственное отличие состоит в том, что суммирование по \mathbf{w} происходит теперь в трехмерном \mathbf{w} -пространстве. После этих подготовительных замечаний мы в состоянии предпринять *квантование электромагнитного поля*.

Исходным пунктом для нас являются уравнения Максвелла в вакууме, которые в системе СГС имеют следующий вид (при $\mathbf{H} = \mathbf{B}$ и $\mathbf{E} = \mathbf{D}$):

$$\text{rot } \mathbf{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{H}} = 0, \quad (11.14)$$

$$\text{rot } \mathbf{H} - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{E}} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (11.15)$$

$$\text{div } \mathbf{H} = 0, \quad (11.16)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = 4\pi\rho. \quad (11.17)$$

Поскольку, согласно (11.16), дивергенция \mathbf{H} равна нулю, то вектор \mathbf{H} можно рассматривать как ротор некоторого векторного потенциала \mathbf{A} :

$$\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (11.18)$$

Если подставить (11.18) в (11.14), то оказывается, что \mathbf{E} можно

представить в виде

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} - \text{grad } V, \quad (11.19)$$

где V представляет скалярный электрический потенциал. Заменяя в уравнении (11.15) \mathbf{H} через (11.18) и \mathbf{E} через (11.19), получаем

$$\frac{1}{c^2} \ddot{\mathbf{A}} - \Delta \mathbf{A} + \text{grad} \left(\text{div } \mathbf{A} + \frac{1}{c} \dot{V} \right) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (11.20)$$

С другой стороны, после подстановки (11.19) в (11.17) получается уравнение

$$-\Delta V - \frac{1}{c} \text{div } \dot{\mathbf{A}} = 4\pi\rho. \quad (11.21)$$

Потенциалы \mathbf{A} и V определены неоднозначно и могут быть перекалиброваны с помощью *калибровочного преобразования*

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' - \text{grad } \chi, \quad V = V' + \frac{1}{c} \dot{\chi}. \quad (11.22)$$

Эти калибровочные преобразования могут быть использованы для дальнейшего упрощения уравнений (11.20) и (11.21). Известным условием является *условие Лоренца*

$$\text{div } \mathbf{A} + \frac{1}{c} \dot{V} = 0, \quad (11.22a)$$

с помощью которого уравнения (11.20) и (11.21) принимают следующий простой вид:

$$\square \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (11.23)$$

$$\square V = -4\pi\rho, \quad (11.24)$$

где оператор \square определен следующим образом:

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{d^2}{dt^2}. \quad (11.25)$$

В последующем изложении, однако, мы будем использовать не эту калибровку, а *кулоновскую калибровку*, которая определяется следующим образом:

$$\text{div } \mathbf{A} = 0. \quad (11.26)$$

Согласно кулоновской калибровке векторный потенциал содержит только поперечные волны. Разложим в общем случае \mathbf{A} по плоским волнам:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{w}} \mathbf{A}_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} + \text{к.с.}, \quad (11.27)$$

тогда в силу линейной независимости экспоненциальных функций и условия $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$ отсюда следует соотношение

$$\mathbf{A}_w \mathbf{w} = 0, \quad (11.28)$$

которое и означает поперечность векторного потенциала. В кулоновской калибровке (11.26) исходные уравнения (11.20) и (11.21) принимают вид

$$\Delta V = -4\pi\rho \quad (11.29)$$

и

$$\square \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \operatorname{grad} \dot{V}. \quad (11.30)$$

Уравнение (11.29) представляет собой хорошо известное уравнение Пуассона, в котором можно также считать, что плотность заряда зависит от времени. В этом параграфе мы исследуем вакуум без зарядов и токов, т. е. *рассматриваем квантование волнового уравнения*¹⁾

$$\square \mathbf{A} = 0. \quad (11.31)$$

Уравнение (11.31), очевидно, представляет собой совокупность трех волновых уравнений вида (11.1) для отдельных компонент векторного потенциала. На этом основании мы можем тотчас построить функцию Лагранжа, являющуюся обобщением функции Лагранжа (11.4), и записать ее в виде

$$L = \operatorname{const} \int \left(\frac{\dot{\mathbf{A}}^2}{2c^2} - \frac{1}{2} (\operatorname{grad} A_x)^2 - \frac{1}{2} (\operatorname{grad} A_y)^2 - \frac{1}{2} (\operatorname{grad} A_z)^2 \right) d^3x. \quad (11.32)$$

Кроме того, мы должны учесть дополнительные условия (11.26), благодаря чему при квантовании возникнут определенные отличия от одномерного случая. Константа в (11.32) остается пока еще неопределенной, поскольку при построении волнового уравнения из уравнений Лагранжа она выпадает. Однако мы можем ее найти, для чего построим функцию Гамильтона и потребуем, чтобы функция Гамильтона соответствовала классическому выражению энергии электромагнитного поля. Как известно, это классическое выражение имеет следующий вид:

$$U = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) d^3x. \quad (11.33)$$

¹⁾ В последующем изложении будем считать, что V не является динамической переменной, а является классической функцией, определяемой через плотность заряда ρ . В нашем случае следует считать эту функцию равной нулю.

Выражая здесь \mathbf{E} и \mathbf{H} с помощью соотношений (11.18) и (11.19) через векторный потенциал, непосредственно получаем

$$U = \frac{1}{8\pi} \int \frac{\dot{\mathbf{A}}^2}{c^2} d^3x + \frac{1}{8\pi} \int (\text{rot } \mathbf{A})^2 d^3x. \quad (11.34)$$

Переписывая выражение $(\text{rot } \mathbf{A})^2$ в компонентах и учитывая, что $\text{div } \mathbf{A} = 0$, получаем с помощью интегрирования по частям следующее выражение для U , которое одновременно идентично выражению для функции Гамильтона (соответствующие промежуточные вычисления можно найти в конце этого параграфа):

$$\left| \begin{aligned} H = \frac{1}{4\pi} \left(\int \frac{\dot{\mathbf{A}}^2}{2c^2} d^3x + \right. \\ \left. + \int \frac{1}{2} ((\text{grad } A_x)^2 + (\text{grad } A_y)^2 + (\text{grad } A_z)^2) d^3x. \right) \end{aligned} \right. \quad (11.35)$$

Переходя теперь к канонически сопряженным импульсам, следует учесть, что теперь у нас есть три компоненты вектора \mathbf{A} и соответственно этому три набора канонически сопряженных импульсов, которые с учетом правила (11.6) и функции Лагранжа (11.32) даются следующими выражениями:

$$\left| \begin{aligned} \Pi_x(\mathbf{x}) &= \frac{\delta L}{\delta \dot{A}_x(\mathbf{x})} = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_x(\mathbf{x}), \\ \Pi_y(\mathbf{x}) &= \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_y(\mathbf{x}), \quad \Pi_z(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi c^2} \dot{A}_z(\mathbf{x}). \end{aligned} \right. \quad (11.36)$$

Совершенно аналогично предыдущему рассмотрению, можно вновь разложить \mathbf{A} по плоским волнам, вводя одновременно наши уже хорошо известные безразмерные амплитуды b и b^+ . Поскольку \mathbf{A} является вектором, при разложении по плоским волнам наряду с волновым вектором \mathbf{w} следует ввести еще один индекс j для вектора поляризации \mathbf{e} , который может принимать значения 1 или 2. Вектор поляризации мы обозначим $\mathbf{e}_{\mathbf{w},j}$. Учитывая, что плотность массы теперь формально должна быть заменена на $1/(4\pi c^2)$, получаем разложение следующего вида:

$$\left| \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{w},j} \sqrt{\frac{\hbar 2\pi c^2}{\omega_{\mathbf{w}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j} + \mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j}^+ \right). \right. \quad (11.37)$$

Поскольку мы находимся еще в «классической области», $b_{\mathbf{w},j}$ и $b_{\mathbf{w},j}^+$ являются еще обычными классическими, зависящими от времени функциями. Однако, имея в виду последующее квантование, у комплексно сопряженной с b величины мы поставили

значок (+) вместо (*). Ввиду *поперечности* \mathbf{A} справедливо соотношение

$$\mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \cdot \mathbf{w} = 0, \quad j = 1, 2. \quad (11.38)$$

Далее можно принять, что направления поляризации взаимно перпендикулярны, т. е. имеет место соотношение

$$\mathbf{e}_{\mathbf{w},1} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{w},2} = 0. \quad (11.39)$$

Для канонически сопряженных импульсов, совершенно аналогично скалярному полю, получаем разложение

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{4\pi c^2} \dot{\mathbf{A}} = \\ &= i \sum_{\mathbf{w},j} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{w}}}{2 \cdot 4\pi c^2}} \cdot \left(-\mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j} + \mathbf{e}_{\mathbf{w},j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w},j}^+ \right). \end{aligned} \quad (11.40)$$

После этой подготовки можно обратиться к квантованию поля. Для отдельных компонент вектора, по аналогии со скалярным полем, можно принять, что коммутаторы между полями и канонически сопряженными импульсами исчезают:

$$[A_i(\mathbf{x}), A_j(\mathbf{x}')] = 0, \quad (11.41)$$

$$[\Pi_i(\mathbf{x}), \Pi_j(\mathbf{x}')] = 0, \quad (11.42)$$

$$i = x, y, z, \quad j = x, y, z.$$

Единственное обобщение теперь состоит в том, что мы требуем выполнения этих соотношений также для отдельных i - и j -компонент. Обратимся теперь к вопросу о том, как выглядят перестановочные соотношения между компонентой l канонически сопряженного импульса Π и компонентой j амплитуды поля \mathbf{A} . Для этого введем, и это следует настоятельно подчеркнуть, *в виде пробы* следующее перестановочное соотношение:

$$[\Pi_l(\mathbf{x}), A_j(\mathbf{x}')] = \frac{\hbar}{i} \delta_{lj} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (11.43)$$

Проверим теперь, увязывается ли перестановочное соотношение (11.43) с равенством «дивергенции поля нулю», т. е. с условием (11.26). Для этого дифференцируем левую часть уравнения (11.43) по x_j , суммируем по j и сразу находим в силу (11.26), что

$$\operatorname{div}_{\mathbf{x}'} [\Pi_l(\mathbf{x}), \mathbf{A}(\mathbf{x}')] \equiv [\Pi_l(\mathbf{x}), \operatorname{div}_{\mathbf{x}'} \mathbf{A}(\mathbf{x}')] = 0. \quad (11.44)$$

Применяя операцию дивергенции к правой части уравнения (11.43), получаем

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{\partial}{\partial x_i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \neq 0, \quad (11.45)$$

т. е. отличное от нуля выражение, что противоречит (11.44). Поэтому мы вынуждены изменить перестановочные соотношения (11.43). Для этого рассмотрим дивергенцию выражения

$$\delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 w e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \delta_{ij} \quad (11.46)$$

более обстоятельно, для чего образуем выражение

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 w (-i w_i) e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \quad (11.47)$$

Теперь спрашивается, как следует изменить δ -функцию, чтобы достичь равенства нулю дивергенции от правой части (11.43). Поскольку наряду с δ_{ij} имеется лишь единственный другой тензор второго ранга $w_i w_j$, то $\delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ можно изменить следующим образом:

$$F_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 w e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} (\delta_{ij} - w_i w_j f(w)). \quad (11.48)$$

Для отыскания стоящей здесь еще неопределенной функции f , которая зависит только от переменной \mathbf{w} , построим дивергенцию $F_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Эта дивергенция приводит нас к соотношению

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} F_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 w e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} (-i w_i + i w_i (w_1^2 + w_2^2 + w_3^2) f(w)). \end{aligned} \quad (11.49)$$

Для того чтобы правая часть исчезла, достаточно, очевидно, выбрать $f(\mathbf{w})$ в виде

$$f(w) = \frac{1}{w^2}. \quad (11.50)$$

Это приводит нас к заключению, что изменение правой части перестановочного соотношения (11.43) должно состоять в замене $\delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ на так называемую *поперечную δ -функцию*

$$\delta_{ij}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 w e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \left(\delta_{ij} - \frac{w_i w_j}{w^2} \right). \quad (11.51)$$

Интеграл (11.51) легко вычисляется, если выразить w_i и w_j через производные экспоненциальной функции по x_j и x_i . Тогда (11.51) можно представить в виде

$$\delta_{ij}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 w e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{1}{w^2} \right). \quad (11.52)$$

Стоящий в скобках интеграл вычисляется просто и равен

$$\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (11.53)$$

Вводя, наконец, полученное выражение (11.52) с учетом (11.53) в правую часть (11.43), получаем перестановочное соотношение между канонически сопряженным импульсом Π и полем A в окончательном виде

$$\left\{ \begin{aligned} [\Pi_i(\mathbf{x}), A_j(\mathbf{x}')] &= \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}^{\text{tr}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \equiv \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(\delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right). \end{aligned} \right. \quad (11.54)$$

Однако при установлении перестановочных соотношений подобного рода (если уж указывать, какие принципы лежат в их основе) нужно иметь полную ясность относительно того, что введению их сопутствует некоторый эвристический элемент. Являются ли перестановочные соотношения верными или нет, можно установить в конце концов только при экспериментальной проверке выведенных на их основе положений. Мы сейчас увидим, что перестановочные соотношения действительно прямо приводят к описанию электромагнитного поля с помощью обычных операторов рождения и уничтожения квантов света. Чтобы показать это, вновь подставим, точно так же как и в случае скалярного поля, разложения (11.37) и (11.40) в левую часть (11.54) и после выполнения преобразования Фурье получим перестановочные соотношения для операторов рождения и уничтожения $b_{\mathbf{w},j}$, $b_{\mathbf{w},j}^+$. Вычисления проводятся в принципе так же, как и в дискретном случае § 8, так что мы эти несколько скучные вычисления, которые не ведут ни к каким новым физическим результатам, не будем воспроизводить. Конечный результат показывает, что перестановочные соотношения полностью аналогичны случаю дискретной решетки или случаю континуума со скалярным полем, т. е. имеют вид

$$\left\{ \begin{aligned} [b_{\mathbf{w},j}, b_{\mathbf{w}',j'}^+] &= \delta_{jj'} \delta_{\mathbf{w}\mathbf{w}'}, \end{aligned} \right. \quad (11.55)$$

$$\left\{ \begin{aligned} [b_{\mathbf{w},j}, b_{\mathbf{w}',j'}] &= 0, \end{aligned} \right. \quad (11.56)$$

$$\left\{ \begin{aligned} [b_{\mathbf{w},j}^+, b_{\mathbf{w}',j'}^+] &= 0. \end{aligned} \right. \quad (11.57)$$

С помощью только что использованных разложений (11.37) и (11.40) можно вычислить также оператор Гамильтона, для чего следует подставить эти разложения в выражение (11.35) и провести интегрирование. Оператор Гамильтона тогда принимает хорошо известный нам вид

$$\left| \quad H = \sum_{\mathbf{w}, j} \hbar \omega_{\mathbf{w}} (b_{\mathbf{w}, j}^+ b_{\mathbf{w}, j} + 1/2). \quad (11.58) \right.$$

Сумма $\sum_{\mathbf{w}, j} (1/2) \hbar \omega_{\mathbf{w}}$ представляет нулевую энергию. Поскольку частоты с ростом \mathbf{w} растут и сумма распространяется на бесконечное число значений \mathbf{w} , это выражение расходится. Однако, поскольку нулевая энергия вакуума ненаблюдаема, мы можем спокойно опустить это выражение. Число фотонов моды \mathbf{w} , j описывается оператором

$$n_{\mathbf{w}, j} = b_{\mathbf{w}, j}^+ b_{\mathbf{w}, j}. \quad (11.59)$$

Собственные состояния уравнения Шредингера с оператором Гамильтона (11.58) имеют тот же самый вид, что и в предыдущих параграфах:

$$\left| \quad \Phi = \prod_{\mathbf{w}, j} \frac{1}{\sqrt{n_{\mathbf{w}, j}!}} (b_{\mathbf{w}, j}^+)^{n_{\mathbf{w}, j}} \Phi_0, \quad (11.60) \right.$$

где $\prod_{\mathbf{w}, j}$ означает произведение по всем значениям волнового вектора \mathbf{w} и индексам поляризации j . Оператор числа фотонов $n_{\mathbf{w}, j}$ может принимать только какие-либо целые значения 0, 1, 2, ... На практике большинство $n_{\mathbf{w}, j} = 0$ и только некоторые немногие $\neq 0$. Положим теперь по определению $(b^+)^0 = 1$. Вакуумное состояние Φ_0 , как обычно, определяется свойством

$$b_{\mathbf{w}, j} \Phi_0 = 0 \quad \text{для всех } \mathbf{w}, j.$$

Поскольку операторы b^+ между собой коммутируют, порядок степеней в (11.60) произволен.

Суммируем теперь кратко наши результаты! Мы видели, что векторный потенциал при квантовании электромагнитного поля становится оператором. Экспериментально наблюдаемыми величинами или, по принятой в квантовой механике терминологии, наблюдаемыми являются, собственно говоря, электрическое поле \mathbf{E} и магнитное поле \mathbf{H} , которые в выбранной нами кулоновской калибровке связаны с \mathbf{A} равенствами

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}, \quad (11.61)$$

$$\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (11.62)$$

Поскольку \mathbf{A} является оператором, полевые величины \mathbf{E} и \mathbf{H}

в квантовой электродинамике также становятся операторами. Элементарное рассмотрение показывает, что \mathbf{H} и \mathbf{E} не коммутируют с оператором Гамильтона ¹⁾.

То обстоятельство, что \mathbf{H} и \mathbf{E} не коммутируют с H , означает, что напряженности полей и число фотонов одновременно точно неизмеримы. Далее, следствием перестановочных соотношений между напряженностями полей и канонически сопряженными импульсами является невозможность одновременного измерения всех компонент напряженностей \mathbf{E} и \mathbf{H} . Тем не менее можно установить, что $\text{div } \mathbf{E}$ коммутирует с H и \mathbf{H} . К взаимодействию квантованного электромагнитного поля с веществом мы еще вернемся позднее в §§ 44 и 45.

Приведем теперь дополнительно для интересующихся читателей доказательство тождественности выражений

$$I = \int (\text{rot } \mathbf{A})^2 d^3x \quad (11.63)$$

и

$$II = \int ((\text{grad } A_x)^2 + (\text{grad } A_y)^2 + (\text{grad } A_z)^2) d^3x. \quad (11.64)$$

При этом следует предположить, что \mathbf{A} исчезает на границе области интегрирования, а $\text{div } \mathbf{A} = 0$. Составим разность выражений (11.63) и (11.64). Применяя краткое обозначение

$$\frac{\partial A_j}{\partial x_i} = A_{j|i}, \quad (11.65)$$

получаем затем

$$I - II = \int ((A_{x|y} - A_{y|x})^2 + (A_{y|z} - A_{z|y})^2 + (A_{z|x} - A_{x|z})^2 - (A_{x|x}^2 + A_{x|y}^2 + A_{x|z}^2 + A_{y|x}^2 + A_{y|y}^2 + A_{y|z}^2 + A_{z|x}^2 + A_{z|y}^2 + A_{z|z}^2)) d^3x. \quad (11.66)$$

Возведение подынтегральных членов в квадрат и приведение подобных членов приведут к выражению

$$I - II = - \int (2A_{x|y}A_{y|x} + 2A_{y|z}A_{z|y} + 2A_{z|x}A_{x|z} + A_{x|x}^2 + A_{y|y}^2 + A_{z|z}^2) d^3x. \quad (11.67)$$

¹⁾ К доказательству этого можно подойти следующим образом. Для H используется выражение (11.58), а вместо \mathbf{A} в соотношения (11.61) и (11.62) подставляют разложение (11.37). Тогда проблема коммутации \mathbf{E} и H или \mathbf{H} и H сводится к анализу перестановочных соотношений (11.55 — 11.57).

После двукратного интегрирования по частям это выражение переходит в следующее:

$$I - II = - \int (2A_{x|x}A_{y|y} + 2A_{y|y}A_{z|z} + 2A_{z|z}A_{x|x} + A_{x|x}^2 + A_{y|y}^2 + A_{z|z}^2) d^3x. \quad (11.68)$$

Последнее выражение можно переписать в виде

$$- \int (\operatorname{div} \mathbf{A})^2 d^3x \equiv 0. \quad (11.69)$$

Это выражение, очевидно, в силу предположения (11.26) тождественно равно нулю.

Задача к § 11

Определить функции Лагранжа и Гамильтона для уравнения $\rho \frac{d^2 \Phi(x, t)}{dt^2} - g\varphi = 0$ и провести его квантование.

§ 12. Квантование шредингеровских волновых полей, подчиняющихся статистике Бозе (вторичное квантование). Бозоны

В предыдущих параграфах было показано, каким образом можно проквантовать волновое уравнение для скалярного или векторного поля. При этом важнейший результат состоял в том, что волновое поле приобретает свойства, характерные для частиц, поскольку в нем имеются в наличии только определенные кванты энергии $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$.

Если вспомнить обычную квантовую механику точечной частицы, обладающей массой, то там, напротив, при квантовании проявляется прямо противоположный эффект: мы исходим из частицы, движение которой описывается уравнениями Гамильтона. Если затем перейти от функции Гамильтона к оператору Гамильтона и соответствующему уравнению Шредингера, то поведение частицы будет описываться с помощью непрерывной в пространстве функции, т. е. с помощью поля. Это поле, так называемое шредингеровское волновое поле, вначале можно попытаться считать классическим, а затем проквантовать его с помощью рецептов, с которыми мы только что познакомились. По аналогии с проведенным выше рассмотрением, следует ожидать, что квантование вновь внесет в описание корпускулярный характер, что позволит лучше описать процессы рождения частиц. Поскольку при этом система вновь некоторым образом квантуется, то эта процедура называется вторичным квантованием, хотя на самом деле, если исходить с самого начала из полевого представления,

речь идет, естественно, о первичном квантовании. Как при первичном, так и при вторичном квантовании понятие частицы никоим образом не заменяется полностью понятием поля и понятие поля никоим образом не заменяется понятием частицы. Более того, появляется новое двойственное представление: в зависимости от экспериментальных условий проявляется либо корпускулярный, либо волновой характер поля.

Область	Квантовая механика	Квантованные поля
Исходная концепция	частица	волновое поле
Результат первичного квантования	также волновое поле	также частица
<i>Вторичное квантование</i>		
Механика:	частица	} дуализм } } дуализм } частица — волна
Первичное квантование:	поле	
Вторичное квантование:	частица	

Мы проведем программу вторичного квантования в два этапа. Вначале займемся рассмотрением классического поля, а затем квантуем его.

а) **Классическое волновое поле.** В качестве *классического «волнового» уравнения* нам будет служить уравнение Шредингера

$$\left| \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(\mathbf{x}) \psi = i\hbar \dot{\psi}, \end{aligned} \right. \quad (12.1)$$

а также комплексно сопряженное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V(\mathbf{x}) \psi^* = -i\hbar \dot{\psi}^*. \quad (12.2)$$

Поскольку ψ и ψ^* являются комплексными функциями координаты \mathbf{x} и времени t , мы можем рассматривать, как независимые друг от друга, либо их действительные и мнимые части, либо с таким

же успехом, сами ψ и ψ^* . В последующем изложении мы будем использовать последнее предположение. Теперь для нас (12.1) и (12.2) являются уравнениями *классического* поля. Легко указать функцию Лагранжа, уравнения Лагранжа для которой ведут к уравнениям (12.1) и (12.2). Функция Лагранжа подобного рода имеет вид

$$L = \int \psi^* \left\{ i\hbar \dot{\psi} - V(x) \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right\} d^3x. \quad (12.3)$$

С помощью уравнения Лагранжа сразу же находим

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}^*} - \frac{\delta L}{\delta \psi^*} = - \left\{ i\hbar \dot{\psi} - V(x) \psi + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right\} = 0, \quad (12.4)$$

т. е. просто уравнение поля (12.1). Функция Лагранжа (12.3) ввиду ее несимметричности относительно ψ и ψ^* является неэрмитовой. Можно, конечно, с помощью искусственных приемов сделать ее эрмитовой, однако при этом возникают трудности при формулировке перестановочных соотношений. На этом основании мы сохраним несколько упрощенное выражение (12.3), поскольку все дальнейшие результаты, полученные с его помощью, будут верными. Канонически сопряженный ψ импульс мы введем обычным образом как производную функции Лагранжа

$$\pi = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}} = - \frac{\hbar}{i} \psi^*. \quad (12.5)$$

Функцию Гамильтона получим из функции Лагранжа с помощью следующего соотношения:

$$\begin{aligned} H &= \int (\pi \dot{\psi} - \mathcal{L}) d^3x = \\ &= \int \left\{ i\hbar \dot{\psi} \psi^* - i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \psi^* \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \psi^* V \psi \right\} d^3x. \end{aligned} \quad (12.6)$$

Причем в правой части этого выражения использован явный вид функции Лагранжа (12.3). Поскольку два первых члена взаимно уничтожаются, окончательно находим функцию Гамильтона

$$\left[H = \int \psi^*(x) \left\{ - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right\} \psi(x) d^3x. \right. \quad (12.7)$$

Выражение (12.7) имеет тот же вид, что и среднее значение энергии в шредингеровской волновой механике.

Несмотря на эту аналогию или, вернее, именно благодаря ей, здесь следует указать на одну *понятийную трудность*, которая доставляет много хлопот, в особенности начинающим. *Понятия функции Гамильтона и оператора Гамильтона возникают теперь совершенно другим образом:*

а) в исходном уравнении Шредингера оператор Гамильтона выступает в виде $-\hbar^2/(2m)\Delta + V(\mathbf{x})$;

б) уравнение (12.7) определяет функцию Гамильтона (которая позже становится оператором).

Следовательно, после квантования (12.7) речь идет о совершенно *другом* операторе, который следует четко отличать от вышеупомянутого оператора Гамильтона.

Напомним читателю, что наше рассмотрение находится до некоторой степени в классических рамках. Волновые функции ψ и ψ^* теперь, как и ранее являются классическими полями. По аналогии с рассмотрением колебаний атомной цепочки, разложим амплитуду поля по собственным функциям волнового уравнения. Поскольку теперь место волнового уравнения занимает уравнение Шредингера, имеет смысл попробовать использовать решения уравнения

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi_\mu = i\hbar\dot{\psi}_\mu \quad (12.8)$$

в качестве функций, по которым производится разложение. Эти функции мы запишем в виде

$$\psi_\mu = e^{-\frac{i}{\hbar}E_\mu t} \varphi_\mu(\mathbf{x}). \quad (12.9)$$

Причем считается, что потенциал V не зависит от времени. Разложим теперь волновую функцию $\psi(\mathbf{x})$ по этим собственным функциям φ_μ . Введем временной множитель из (12.9) сразу в коэффициенты разложения

$$b_\mu(t) = b_\mu(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_\mu t}, \quad (12.10)$$

тогда разложения волновых функций ψ и ψ^* принимают следующий вид:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mu} b_{\mu} \varphi_{\mu}(\mathbf{x}), \quad (12.11)$$

$$\psi^*(\mathbf{x}) = \sum_{\mu} b_{\mu}^+ \varphi_{\mu}^*(\mathbf{x}). \quad (12.12)$$

Здесь проявляется существенное различие по сравнению с волновым уравнением, которое содержит вторую производную по времени. Присутствие второй производной по времени ведет к тому, что наряду с решением $e^{i\omega t}$ имеется решение $e^{-i\omega t}$, чем мы воспользовались для конструирования действительной амплитуды. В данном случае мы имеем дело с дифференциальным уравнением, содержащим лишь первую производную по времени, так что мы не можем больше представить ψ как действительную функцию, суммируя комплексно сопряженные решения. Поэтому

следует написать разложения (12.11) и (12.12) для комплексно сопряженных величин. То обстоятельство, что ψ и ψ^* являются независимыми переменными, имеет, с другой стороны, важное значение для последующей формулировки перестановочного соотношения (12.15), так как если, например, ψ и ψ^* совпадают, то соотношение (12.15) становится противоречивым. Поэтому мы будем в дальнейшем считать, что ψ и ψ^* являются независимыми друг от друга переменными.

Вновь воспользуемся свойствами нормированности и взаимной ортогональности собственных функций φ_n . Если подставить теперь разложения (12.11) и (12.12) в функцию Гамильтона (12.7), то непосредственно получим выражение

$$H = \sum_{\mu} E_{\mu} b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu}. \quad (12.13)$$

Исходя из практических соображений, а также для того, чтобы особенно ясно представить аналогию с полученными выше результатами, в последующем изложении мы будем часто полагать

$$E_{\mu} = \hbar \varepsilon_{\mu}, \quad (12.13a)$$

причем ε_{μ} имеет размерность частоты.

До сих пор мы рассматривали теорию, основываясь на том соображении, что ψ представляет классическое поле. Теперь же для того, чтобы выполнить нашу программу до конца, мы должны проквантовать это волновое поле ψ .

б) Квантование. Для квантования введем еще, согласно определению (12.5), канонически сопряженный импульс π , причем правая часть возникает в результате применения явного вида выражения (12.3). Потребуем выполнения между π и ψ обычного перестановочного соотношения

$$[\pi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}')] = \frac{\hbar}{i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (12.14)$$

Используя явный вид π , представим (12.14) в окончательном виде

$$[\psi(\mathbf{x}'), \psi^{\dagger}(\mathbf{x})] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (12.15)$$

Равным образом примем, что волновые функции между собой и канонически сопряженные импульсы между собой коммутируют, что мы сформулируем с помощью нижеследующих перестановочных соотношений:

$$[\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}')] = 0 \quad (12.16)$$

и

$$[\psi^{\dagger}(\mathbf{x}), \psi^{\dagger}(\mathbf{x}')] = 0. \quad (12.17)$$

Теперь можно непосредственно перейти вновь от перестановочных соотношений (12.15), (12.16) и (12.17) к перестановочным соотношениям для амплитуд b_μ и b_μ^+ . Для этого подставим в (12.15), (12.16) и (12.17) разложения (12.11) и (12.12) и разрешим полученные выражения относительно операторов b . Поскольку все это происходит совершенно аналогично изложенному в § 8, мы отсылаем читателя к упражнению 1 в конце этого параграфа и приводим сразу окончательный результат. Мы находим, что перестановочные соотношения для операторов b и b^+ имеют следующий вид:

$$[b_\mu, b_\nu^+] = \delta_{\mu\nu}, \quad (12.18)$$

$$[b_\mu, b_\nu] = 0, \quad (12.19)$$

$$[b_\mu^+, b_\nu^+] = 0. \quad (12.20)$$

Поскольку мы подчинили амплитуды b^+ и b перестановочным соотношениям (12.18—12.20), то классическая функция Гамильтона (12.13) становится оператором Гамильтона и соответственно, ввиду выполнения (12.15—12.17), оператором Гамильтона становится также и (12.7).

Если рассмотреть этот оператор одновременно с перестановочными соотношениями (12.18—12.20), мы обнаружим полную аналогию рассматриваемой здесь проблемы с проблемой, возникшей при квантовании обычного волнового уравнения, например, в § 10. Поэтому можно воспользоваться всеми полученными нами ранее результатами. Мы находим, что уравнению Шредингера¹⁾

$$H\Phi = E\Phi,$$

$$H = \int \psi^+(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right\} \psi(x) d^3x \equiv \sum_{\mu} E_{\mu} b_{\mu}^+ b_{\mu} \quad (12.21)$$

соответствуют состояния вида

$$\Phi = \prod_{\mu} \frac{1}{\sqrt{n_{\mu}!}} (b_{\mu}^+)^{n_{\mu}} \Phi_0. \quad (12.22)$$

Вакуумное состояние Φ_0 вновь определяется следующим образом:

$$b_{\mu} \Phi_0 = 0 \text{ для всех } \mu. \quad (12.23)$$

¹⁾ Так же и здесь следует указать, что выражение «уравнение Шредингера» употребляется в совершенно различных смыслах:

а) в смысле первичного квантования (см. (12.1)); в этом случае соответствующий оператор Гамильтона действует на функцию координат $\psi(x)$;

б) в смысле вторичного квантования (см. выше); в этом случае соответствующий оператор Гамильтона действует на функцию состояния абстрактным образом через операторы рождения и уничтожения.

Соответствующие состояниям (12.22) энергии имеют вид

$$E = \sum_{\mu} E_{\mu} n_{\mu} \quad (n_{\mu} = 0, 1, 2, \dots). \quad (12.24)$$

Результат, представляемый соотношениями (12.22) и (12.24), можно интерпретировать следующим образом: из исходного уравнения Шредингера (12.8) устанавливается последовательность энергетических уровней E_{μ} . Эти отдельные энергетические уровни μ могут, как ясно из (12.24), быть заняты определенным числом n_{μ} квантов, или, иными словами, частиц. Отсюда становится ясно, что квантование поля также и в случае шредингеровского волнового уравнения обеспечивает корпускулярный характер. Таким образом, очевидно, что состояния с энергией E_{μ} можно занять n_{μ} частицами, причем n_{μ} может быть любым целым числом. Следовательно, только что проведенное квантование относится к случаю статистики Бозе. Соответственно этому, частицы, операторы рождения и уничтожения которых удовлетворяют перестановочным соотношениям (12.15—12.17) или (12.18—12.20), называются *бозонами*. Примерами бозонов являются фотоны и ядра He^4 . С другой стороны, электроны, протоны и ряд других частиц подчиняются статистике Ферми — Дирака. Действующий в этом случае принцип Паули утверждает, что нельзя привести две частицы в одинаковое состояние. Очевидно, что для того, чтобы при квантовании поля охватить также и эти частицы, следует изменить соответствующим образом и перестановочные соотношения. Прежде чем мы займемся этим в последующих параграфах, обсудим более подробно вычисления средних значений в рамках нового формализма. Мы будем исходить из классических величин, причем под словом «классический» следует понимать «первично квантованный». Этим классическим величинам поставим в соответствие оператор, с помощью которого образуем средние значения. Применим теперь этот формализм к некоторым примерам.

Пример 1. Оператор плотности числа частиц. В теории Шредингера плотность числа частиц имеет вид

$$\psi^*(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t). \quad (12.25)$$

После вторичного квантования плотность числа частиц становится оператором

$$\rho(\mathbf{x}) = \psi^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}). \quad (12.26)$$

Соответствующее среднее значение для плотности числа частиц определяется согласно следующему правилу:

$$\overline{\rho(\mathbf{x})} = \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) | \Phi \rangle. \quad (12.27)$$

Для пояснения правила (12.27) рассмотрим пример одной частицы, которая находится в некотором состоянии χ . Функция

состояния Φ имеет тогда следующий вид:

$$\Phi = b_{\lambda}^{+} \Phi_0. \quad (12.28)$$

Если теперь подставить разложения (12.11) и (12.12), а также выражение (12.28) в (12.27), то мы получим

$$\left\langle b_{\lambda}^{+} \Phi_0 \left| \sum_{\mu} b_{\mu}^{+} \varphi_{\mu}^{*}(\mathbf{x}) \sum_{\nu} b_{\nu} \varphi_{\nu}(\mathbf{x}) \right| b_{\lambda}^{+} \Phi_0 \right\rangle. \quad (12.29)$$

Применяя перестановочное соотношение (12.18) и используя тот факт, что оператор уничтожения, действующий на вакуумное состояние, дает нуль, во второй сумме по ν непосредственно получаем

$$\left\langle \Phi_0 \left| b_{\lambda} \sum_{\mu} b_{\mu}^{+} \varphi_{\mu}^{*}(\mathbf{x}) \varphi_{\lambda}(\mathbf{x}) \Phi_0 \right\rangle. \quad (12.30)$$

Далее применим (4.18). Если теперь еще раз поменять местами операторы b_{λ} и b_{μ}^{+} , то получится следующий результат:

$$\langle \Phi_0 | \varphi_{\lambda}^{*}(\mathbf{x}) \varphi_{\lambda}(\mathbf{x}) \Phi_0 \rangle. \quad (12.31)$$

Поскольку $\varphi(\mathbf{x})$ является обычной числовой функцией, которая не имеет никакого отношения к построению среднего значения, то эту функцию можно вынести из угловых скобок и поставить перед средним значением, что дает

$$\varphi_{\lambda}^{*}(\mathbf{x}) \varphi_{\lambda}(\mathbf{x}) \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle. \quad (12.32)$$

Поскольку, наконец, волновые функции вакуумного состояния нормированы, то в качестве конечного результата получаем выражение

$$\overline{\rho(\mathbf{x})} = \varphi_{\lambda}^{*}(\mathbf{x}) \varphi_{\lambda}(\mathbf{x}). \quad (12.33)$$

Но это выражение является не чем иным, как обычной плотностью числа частиц в состоянии λ в теории Шредингера.

Пример 2. Оператор координаты. В качестве следующего примера рассмотрим теперь в рамках вторичного квантования построение среднего значения для координаты. В теории Шредингера среднее значение координаты вдоль оси x дается выражением

$$\bar{x} = \int \psi^{*}(\mathbf{x}, t) x \psi(\mathbf{x}, t) d^3x. \quad (12.34)$$

Этому среднему значению мы ставим в соответствие оператор

$$x_{оп} = \int \psi^{+}(\mathbf{x}) x \psi(\mathbf{x}) d^3x. \quad (12.35)$$

Среднее значение этого оператора представляется далее с

помощью следующего выражения:

$$\langle \Phi | x_{оп} | \Phi \rangle = \langle \Phi | \int \psi^+(x) x \psi(x) d^3x | \Phi \rangle. \quad (12.36)$$

Для того чтобы проиллюстрировать этот случай несколько более обстоятельно, вновь воспользуемся волновыми функциями (12.28). Тогда после преобразований совершенно аналогичных тем, которые были проведены в (12.29—12.33), в качестве окончательного результата получаем выражение

$$\bar{x} = \int \varphi_x^*(\mathbf{x}) x \varphi_x(\mathbf{x}) d^3x. \quad (12.37)$$

Весьма поучительный случай двух частиц рассматривается в упражнениях.

Пример 3. Оператор потенциальной энергии во внешнем поле. В качестве следующего примера рассмотрим потенциальную энергию, которая в теории Шредингера описывается выражением

$$\int \psi^*(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) d^3x. \quad (12.38)$$

Ей соответствует оператор

$$V_{оп} = \int \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3x \quad (12.39)$$

и среднее значение

$$\bar{V} = \langle \Phi | \int \psi^+(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3x | \Phi \rangle. \quad (12.40)$$

При $\Phi = b_x^+ \Phi_0$ среднее значение равно

$$\bar{V} = \int \varphi_x^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \varphi_x(\mathbf{x}) d^3x.$$

Пример 4. Оператор энергии кулоновского взаимодействия. Несколько менее тривиальный случай возникает при исследовании энергии взаимодействия двух частиц, например энергии кулоновского отталкивания. Если вспомнить, что $e\psi^+\psi$ дает плотность заряда частицы, то согласно электростатике для энергии взаимодействия плотностей зарядов получается следующее выражение:

$$\frac{1}{2} \int \underbrace{\psi^*(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)}_{\rho(\mathbf{x}, t)} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \underbrace{\psi^*(\mathbf{x}', t) \psi(\mathbf{x}', t)}_{\rho(\mathbf{x}', t)} d^3x d^3x'. \quad (12.41)$$

При переводе этого выражения в квантовую форму возникает характерная трудность. В классической теории волновые функ-

ции коммутируют, т. е. точный порядок следования этих функций безразличен. В квантовой теории, однако, волновые функции, напротив, не коммутируют, а удовлетворяют перестановочным соотношениям (12.15). Поэтому в зависимости от того, в каком порядке расположить операторы ψ и ψ^+ , получаются разные результаты. При выборе порядка расположения операторов выражения (12.41) в квантовой теории мы будем руководствоваться тем, что если имеется только одна частица, то кулоновское взаимодействие равно нулю. Отсюда следует, что мы должны писать оператор уничтожения ψ справа, а оператор рождения ψ^+ слева. Кроме того, аргументы \mathbf{x} и \mathbf{x}' следует писать в том порядке, в котором они стоят в выражении (12.42), с тем чтобы при образовании среднего значения мы могли вернуться назад к обычной энергии взаимодействия в уравнении Шредингера. Ввиду весьма близкого к предыдущим рассуждениям изложения этой задачи, мы отсылаем читателя к упражнениям.

Учитывая эти ограничения, энергии кулоновского взаимодействия (12.41) следует поставить в соответствие следующий оператор:

$$\left[\frac{1}{2} \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) d^3x d^3x' \right] \quad (12.42)$$

Среднее значение тогда определяется выражением

$$\left\langle \Phi \left| \frac{1}{2} \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) d^3x d^3x' \right| \Phi \right\rangle. \quad (12.43)$$

Задания к § 12

1. Разрешить (12.11) и (12.12) относительно b_μ и b_μ^+ .

Указание к (12.11). Умножить обе части (12.11) на $\varphi_{\mu'}^*(\mathbf{x})$ и проинтегрировать по пространству. Ввиду ортогональности волновых функций $\int \varphi_{\mu'}^*(\mathbf{x}) \varphi_\mu(\mathbf{x}) d^3x = \delta_{\mu\mu'}$, сразу же получается выражение для $b_{\mu'}$.

2. Еще одно новое представление δ -функции: $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \sum_{\mu} \varphi_{\mu}^*(\mathbf{x}') \varphi_{\mu}(\mathbf{x})$.

Положить $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \sum_{\mu} c_{\mu} \varphi_{\mu}(\mathbf{x})$, причем суммирование ведется по полному набору собственных функций, и показать, что $c_{\mu} = \varphi_{\mu}^*(\mathbf{x}')$.

Указание. Как к заданию 1.

3. Вычислить среднее значение оператора координаты (12.35) для двухчастичного состояния $\Phi = b_{\mu_1}^+ b_{\mu_2}^+ \Phi_0$.

4. Вычислить среднее значение кулоновского взаимодействия (12.43) для $\Phi = b_{\mu_1}^+ \Phi_0$ и $\Phi = b_{\mu_1}^+ b_{\mu_2}^+ \Phi_0$.

Указание. Подставить разложения (12.11) и (12.12) в (12.43), учитывая, что b_{μ} и b_{μ}^+ теперь операторы.

§ 13. Квантование шредингеровских волновых полей, подчиняющихся статистике Ферми — Дирака. Фермионы

Как мы видели в предыдущих параграфах, шредингеровское волновое поле может быть квантовано совершенно аналогично волновому полю, описывающему, например, колебания решетки, причем вновь проявляется корпускулярный характер поля. Правда, мы обнаружили, что каждое состояние может быть занято многими частицами. Чтобы исключить эту возможность в статистике Ферми — Дирака, нам следует изменить перестановочные соотношения. Для этого вновь будем исходить из разложения волновых функций $\psi(\mathbf{x})$ и $\psi^+(\mathbf{x})$ в виде (12.11) и (12.12). Эти разложения представим в виде

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mu} a_{\mu} \varphi_{\mu}(\mathbf{x}), \quad (13.1)$$

$$\psi^+(\mathbf{x}) = \sum_{\mu} a_{\mu}^+ \varphi_{\mu}^*(\mathbf{x}). \quad (13.1a)$$

Здесь $\varphi_{\mu}(\mathbf{x})$ и $\varphi_{\mu}^*(\mathbf{x})$ должны быть собственными волновыми функциями уравнения Шредингера в представлении первичного квантования:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mu}(\mathbf{x}) = E_{\mu} \varphi_{\mu}(\mathbf{x}). \quad (13.1b)$$

При этом коэффициенты разложения («амплитуды») мы обозначили не через b , как раньше, а через a , чтобы подчеркнуть, что последние как операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям нового типа, обсуждением которых мы теперь займемся. Для этого предположим, что имеется вакуумное состояние Φ_0 , а a_{μ}^+ вновь имеет смысл оператора рождения. Тогда формально можно создать две частицы в одном и том же состоянии μ , для чего образуем выражение $a_{\mu}^+ a_{\mu}^+ \Phi_0$. Поскольку, однако, в природе такое состояние не может быть реализовано, потребуем, чтобы

$$a_{\mu}^+ a_{\mu}^+ \Phi_0 = 0. \quad (13.2)$$

Это требование должно выполняться не только для вакуумного состояния Φ_0 , но и для любого состояния Φ . Но если соотношение вида (13.2) выполняется для всех Φ , то отсюда следует, что

в квантовой теории

$$a_{\mu}^{+} a_{\mu}^{+} = 0. \quad (13.3)$$

Теперь сформулируем перестановочное соотношение между a_{μ}^{+} и a_{ν}^{+} , которое содержит условие (13.3) в качестве частного случая. Перестановочное соотношение такого рода можно представить следующим образом:

$$a_{\mu}^{+} a_{\nu}^{+} + a_{\nu}^{+} a_{\mu}^{+} = 0. \quad (13.4)$$

Решающим моментом в этих перестановочных соотношениях по сравнению с бозевскими перестановочными соотношениями является замена знака «минус» на знак «плюс». Теперь кажется естественным везде заменить знак минус на плюс, т. е. ввести в качестве перестановочных соотношений для ферми-частиц следующие перестановочные соотношения:

$$a_{\mu}^{+} a_{\nu}^{+} + a_{\nu}^{+} a_{\mu}^{+} = 0, \quad (13.4)$$

$$a_{\mu}^{+} a_{\nu} + a_{\nu} a_{\mu}^{+} = \delta_{\mu\nu}, \quad (13.5)$$

$$a_{\mu} a_{\nu} + a_{\nu} a_{\mu} = 0. \quad (13.6)$$

Эти «плюс»-перестановочные соотношения в последующем изложении мы кратко обозначим следующим образом:

$$[A, B]_{+} = AB + BA. \quad (13.7)$$

Хотя на основании высказанных выше соображений одновременное введение знака плюс везде, где до этого стоял минус, кажется удовлетворительным, это не является, однако, достаточным обоснованием для квантования поля. Мы увидим, что эти новые перестановочные соотношения ведут к антисимметричным волновым функциям в координатном пространстве. Эти антисимметричные волновые функции являются, как известно из преддингеровской теории многих частиц, типичными для статистики Ферми — Дирака. Мы никоим образом не предполагаем, что читатель знаком с упомянутой выше теорией многих частиц, а ставим во главу угла (в известной степени аксиоматически) соотношения (13.4—13.6) и вводим затем подходящие свойства многочастичных волновых функций. Поскольку полевые операторы $\psi(\mathbf{x})$ и $\psi^{+}(\mathbf{x})$ связаны с операторами a_{μ} и a_{μ}^{+} через разложения (13.1) и (13.1а), то перестановочные соотношения (13.4—13.6) имеют своим следствием, естественно, перестановочные соотношения для ψ и ψ^{+} и наоборот. Поскольку все вычисления аналогичны приведенным выше, мы опустим их точное воспроизведение, а интересующегося читателя отсылаем к заданию 1.

Обсуждаемые сейчас перестановочные соотношения между ψ и ψ^+ имеют следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} [\psi^+(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}')]_+ \equiv \psi^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}') + \psi(\mathbf{x}')\psi^+(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\ [\psi^+(\mathbf{x}), \psi^+(\mathbf{x}')]_+ \equiv \psi^+(\mathbf{x})\psi^+(\mathbf{x}') + \psi^+(\mathbf{x}')\psi^+(\mathbf{x}) = 0, \\ [\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}')]_+ \equiv \psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}') + \psi(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}) = 0. \end{array} \right. \quad (13.8)$$

Частицы, операторы рождения и уничтожения которых удовлетворяют перестановочным соотношениям (13.4—13.6) или (13.8), называются *ферми-частицами* (*фермионами*). Сравнение этих перестановочных соотношений с перестановочными соотношениями для бозевского поля показывает, что всюду, где раньше стоял знак минус, теперь стоит знак плюс. Кроме этого обстоятельства, весь формализм предыдущих параграфов полностью остается в силе. Оператор Гамильтона вновь дается выражением (12.21) и принимает следующий вид:

$$\left\{ H = \int \psi^+(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) d^3x \equiv \sum_{\mu} E_{\mu} a_{\mu}^+ a_{\mu}. \right. \quad (13.9)$$

Соответствующее уравнение Шредингера для квантованного состояния имеет вид

$$H\Phi = E\Phi. \quad (13.9a)$$

Собственные функции (состояния) и собственные энергии для (13.9) находят точно так же, как в бозевском случае в § 12.

Мы постулируем существование основного состояния Φ_0 , обладающего следующим свойством:

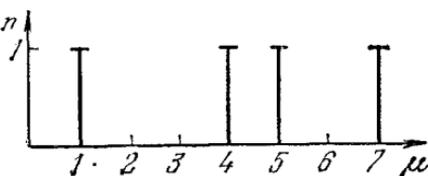


Рис. 22. Пример функции состояния $\Phi_{\{n\}}$ при $\{n\} = \{1, 0, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, \dots\}$.

Здесь мы формально полагаем $(a_{\mu}^+)^0 = 1$ и учитываем ввиду $(a_{\mu}^+)^2 = 0$, что показатели n могут принимать значения только 0 или 1. На рис. 22 представлен пример для $\{n\}$. Здесь

$$\{n\} = \{1, 0, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, \dots\}.$$

Энергия E дается следующим выражением:

$$\left\{ E = \sum_{\mu} E_{\mu} n_{\mu}, \right. \quad (13.12)$$

а в качестве функции состояния получаем

$$a_{\mu} \Phi_0 = 0 \text{ для всех } \mu, \quad (13.10)$$

$$\Phi_{\{n\}} = \prod_{\mu} (a_{\mu}^+)^{n_{\mu}} \Phi_0. \quad (13.11)$$

где $n_\mu = 0$ или 1. Полное число частиц равно

$$N = \sum_{\mu} n_{\mu}. \quad (13.12a)$$

В нашем примере, следовательно, имеются четыре частицы.

Если полное заданное число частиц равно N , то, следовательно, только N чисел заполнения $n_\mu = 1$. Поэтому наряду с (13.11) применяется еще одно очевидное представление, в котором с самого начала учитывают только $n_\mu = 1$:

$$\Phi_{\{n\}} = a_{\mu_1}^+ a_{\mu_2}^+ \dots a_{\mu_N}^+ \Phi_0. \quad (13.11a)$$

При этом мы условимся, что $\mu_1 < \mu_2 < \dots < \mu_N$.

В приведенном на рис. 22 примере имеем $\mu_1 = 1$, $\mu_2 = 4$, $\mu_3 = 5$, $\mu_4 = 7$. Познакомимся теперь с этим формализмом несколько обстоятельнее. Для этого рассмотрим наиболее общее одночастичное состояние. Такое состояние задается суперпозицией одночастичных состояний $a_{\mu}^+ \Phi_0$:

$$\Phi = \sum_{\mu} c_{\mu} a_{\mu}^+ \Phi_0, \quad (13.13)$$

причем постоянные коэффициенты c_{μ} , с точностью до условия нормировки $\sum_{\mu} |c_{\mu}|^2 = 1$, являются еще совершенно произвольными. Мы сможем перейти к другому представлению состояния Φ , если введем вместо операторов рождения a_{μ}^+ операторы $\psi^+(x)$. Для этого умножим (13.1a) на $\varphi_{\mu}(x)$ и проинтегрируем по объему. Тогда получим, учитывая ортогональность и нормировку функций φ_{μ} , по которым ведется разложение, представление операторов a_{μ}^+ через $\psi^+(x)$:

$$a_{\mu}^+ = \int \varphi_{\mu}(x) \psi^+(x) d^3x. \quad (13.14)$$

Если подставить (13.14) в (13.13), то получим

$$\Phi = \int \underbrace{\sum_{\mu} c_{\mu} \varphi_{\mu}(x)}_{f(x)} \psi^+(x) d^3x \Phi_0. \quad (13.15)$$

Сумма по μ представляет собой, как показано фигурной скобкой, некоторую функцию $f(x)$, так что мы можем переписать Φ в виде

$$\Phi = \int f(x) \psi^+(x) d^3x \Phi_0. \quad (13.16)$$

Как мы покажем сейчас, функция $f(x)$ удовлетворяет обычному одночастичному уравнению Шредингера. Выражение (13.16) можно интерпретировать следующим образом. Ниже мы увидим, что оператор $\psi^+(x)$ создает в точке x одну частицу. Следователь-

но, Φ представляет наложение одночастичных состояний, которые можно представлять себе возникающими в различных точках пространства, каждое со своей «амплитудой вероятности» $f(\mathbf{x})$. Теперь покажем, что $\psi^+(\mathbf{x}')$ действительно создает одну частицу в точке \mathbf{x}' , т. е. что

$$\psi^+(\mathbf{x}')\Phi_0 \quad (13.17)$$

представляет частицу в точке \mathbf{x}' . Для доказательства подействуем на (13.17) оператором плотности числа частиц $\rho(\mathbf{x}) = \psi^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$. Тогда с учетом применения перестановочных соотношений (13.8) и того обстоятельства, что действие ψ на вакуумное состояние дает нуль, мы получим следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \psi^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\psi^+(\mathbf{x}')\Phi_0 &= \psi^+(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\Phi_0 = \\ &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\psi^+(\mathbf{x}')\Phi_0. \end{aligned} \quad (13.18)$$

Эти соотношения утверждают, что функции (13.17) являются собственными функциями оператора плотности числа частиц, причем собственное значение $= 0$, если координата \mathbf{x}' не совпадает с координатой \mathbf{x} , и собственное значение $= 1$ при интегрировании в окрестности точки $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$.

Подставим теперь общие одночастичные функции (13.16) во вторично квантованное уравнение Шредингера (13.9а), причем выберем H в пригодном для фермионов виде (12.7). Тогда ψ^+ и ψ являются, естественно, операторами, которые подчиняются плюс-перестановочным соотношениям.

Составим в левой части уравнения Шредингера (13.9а) выражение

$$H\Phi = \int \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) d^3x \int f(\mathbf{x}') \psi^+(\mathbf{x}') d^3x' \Phi_0. \quad (13.19)$$

Это выражение при использовании перестановочного соотношения (13.8) переходит в

$$H\Phi = \iint f(\mathbf{x}') \left\{ \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3x d^3x' \Phi_0 \right\}. \quad (13.20)$$

Учитывая равенство $\Delta_{\mathbf{x}}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \Delta_{\mathbf{x}'}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ и свойства δ -функции, вместо (13.20) получаем

$$H\Phi = \int \psi^+(\mathbf{x}) \Phi_0 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) f(\mathbf{x}) d^3x. \quad (13.21)$$

Поскольку согласно уравнению Шредингера должно иметь место

равенство $H\Phi = E\Phi$, то мы приходим к утверждению, что (13.21) должно совпадать с выражением

$$E \int f(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}) \Phi_0 d^3x. \quad (13.22)$$

Но так как это соотношение должно выполняться для всех точек \mathbf{x} , а функции $\psi^+(\mathbf{x})\Phi_0$ линейно независимы (см. задание 2), то соотношение (13.21)=(13.22) может выполняться только тогда, когда оно уже выполняется для отдельных множителей при $\psi^+(\mathbf{x})\Phi_0$, т. е., следовательно, если $f(\mathbf{x})$ удовлетворяет обычному уравнению Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})\right)f(\mathbf{x}) = Ef(\mathbf{x}). \quad (13.23)$$

Соответствующее доказательство можно провести также и для зависящего от времени уравнения Шредингера. Этот пример показывает, что в случае *одной* частицы формулировки обычной теории Шредингера и теории вторичного квантования идентичны. Теперь мы покажем на примере двух частиц, что и в случае многих частиц существует эквивалентность между формулировкой в рамках вторичного квантования и обычной многочастичной теорией Шредингера. Следует, однако, совершенно определенно указать на то, что формулировка в рамках вторичного квантования обладает рядом существенных преимуществ и прежде всего потому, что она является адекватной для рассмотрения многих процессов. Рассмотрим теперь наиболее общее состояние двух частиц, которое строится как наложение всех состояний, в которых одна частица находится в состоянии μ_1 , другая — в состоянии μ_2 :

$$\Phi = \sum_{\mu_1\mu_2} c_{\mu_1\mu_2} a_{\mu_1}^+ a_{\mu_2}^+ \Phi_0. \quad (13.24)$$

Заменяя в этом выражении операторы a_{μ}^+ на ψ^+ , согласно (13.14), получаем вместо (13.24):

$$\Phi = \iint \underbrace{\left(\sum_{\mu_1\mu_2} \varphi_{\mu_1}(\mathbf{x}) \varphi_{\mu_2}(\mathbf{x}') c_{\mu_1\mu_2} \right)}_{f(\mathbf{x}, \mathbf{x}')} \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \Phi_0 d^3x d^3x'. \quad (13.25)$$

Сумма по μ_1 и μ_2 представляет обычную функцию координат \mathbf{x} и \mathbf{x}' , которую мы кратко обозначили $f(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, так что Φ можно представить в виде

$$\Phi = \iint f(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \Phi_0 d^3x d^3x'. \quad (13.26)$$

Мы покажем, что функция $f(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ антисимметрична относительно

но координат \mathbf{x} и \mathbf{x}' . Для этого изменим в (13.26) обозначения координат, поменяв \mathbf{x} и \mathbf{x}' местами, тогда (13.26) переходит в выражение

$$\iint f(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \psi^+(\mathbf{x}) \Phi_0 d^3x d^3x'. \quad (13.27)$$

Сравнение этого выражения с (13.26) показывает, что порядок следования операторов ψ^+ теперь изменился. Чтобы получить тот же порядок следования операторов, что и в (13.26), мы переставим оба оператора ψ^+ , причем ввиду перестановочного соотношения (13.8) поменяется знак, так что (13.27) принимает следующий вид:

$$- \iint f(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \Phi_0 d^3x d^3x'. \quad (13.28)$$

После всех этих преобразований выражение (13.26), естественно, не изменилось, так что мы получаем общее соотношение: выражение (13.26) равно выражению (13.28). Однако под интегралами в этих выражениях стоят функции $\psi^+(\mathbf{x})\psi^+(\mathbf{x}')\Phi_0$, которые линейно независимы друг от друга. Поэтому соотношение (13.26) = (13.28) может быть выполнено только в том случае, если выполняется условие

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -f(\mathbf{x}', \mathbf{x}). \quad (13.29)$$

Это условие и показывает, что волновые функции f антисимметричны. С помощью волновых функций (13.26) можно вновь прийти к уравнению Шредингера в представлении вторичного квантования. Для дальнейшего обсуждения нашего примера двух частиц мы выберем оператор Гамильтона уравнения Шредингера в следующем виде:

$$\left| \begin{aligned} H = & \int \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) d^3x + \\ & + \frac{1}{2} \iint \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) d^3x d^3x'. \end{aligned} \right. \quad (13.30)$$

В первом интеграле мы сразу узнаем обычное среднее значение шредингеровской теории для кинетической энергии и энергии в некотором заданном потенциальном поле. Двойной интеграл представляет, очевидно, энергию кулоновского взаимодействия.

Мы не будем проводить подробно решение, получающееся после подстановки (13.26) во вторично квантованное уравнение Шредингера, а отошлем интересующегося читателя к соответствующему упражнению. Здесь мы ограничимся тем, что приведем окончательный результат. Этот результат утверждает, что функ-

ция $f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ удовлетворяет следующему уравнению Шредингера для двух частиц:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}_1} + V(\mathbf{x}_1) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}_2} + V(\mathbf{x}_2) + \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \right\} f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = Ef(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \quad (13.31)$$

Обобщение этого результата на случай n частиц легко угадать, однако его можно также провести строго в рамках формализма вторичного квантования. Для случая n частиц получается уравнение Шредингера следующего вида:

$$\left\{ \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}_j} + V(\mathbf{x}_j) + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \right) \right\} f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = Ef(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N), \quad (13.32)$$

причем f антисимметрична относительно всех координат.

Приведенные выше соображения позволяют нам сформулировать с помощью вторичного квантования многоэлектронную проблему твердого тела (см. § 20).

Этот параграф мы закончим правилами

Вычисления средних значений. Ввиду тесной аналогии между бозе- и ферми-операторами кажется возможным определить средние значения, которые вычисляются с помощью операторов a и a^+ точно так же, как это было сделано для бозе-операторов. Тогда оказывается (см. задание 6), что вычисление средних значений дает тот же результат, что и в теории шредингеровской волновой механики, которая экспериментально лучше всего подтверждена в нерелятивистской области.

Руководствуясь § 4, мы введем *аксиоматически* следующие правила:

Квантовомеханическое среднее значение оператора Ω по состояниям Φ строится следующим образом:

$$|\quad \bar{\Omega} = \langle \Phi | \Omega | \Phi \rangle. \quad (13.33)$$

При этом постоянно предполагается, что Φ нормирована:

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad (13.34).$$

Скобки (бра и кет) должны обладать следующими свойствами:

$$|\quad \langle a\Phi | \chi \rangle = \langle \Phi | a^+\chi \rangle, \quad (13.35)$$

$$|\quad \langle a^+\Phi | \chi \rangle = \langle \Phi | a\chi \rangle. \quad (13.36)$$

Здесь мы опустили индекс μ у операторов уничтожения a и рождения a^+ . Используя перестановочные соотношения (13.4—13.6) и свойство основного состояния, можно установить ортогональ-

ность собственных состояний (13.11) (см. задание 4):

$$\langle \Phi_{\{n\}} | \Phi_{\{m\}} \rangle = \prod_{\mu} \delta_{n_{\mu}, m_{\mu}}, \quad (13.37)$$

т. е. правая часть отлична от нуля только при $n_1 = m_1, n_2 = m_2, \dots, n_{\mu} = m_{\mu}, \dots$

Задания к § 13

1. Вывести соотношения (13.8), исходя из перестановочных соотношений (13.4—13.6).

Указание. Подставить в левую часть (13.8) разложение (13.1) и применить (13.4—13.6), а также представление δ -функции, приведенное в задании 2 § 12.

2. Показать, что функции $\psi^+(\mathbf{x})\Phi_0$ линейно независимы, т. е. что из

$$I = \int g(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}) \Phi_0 d^3x = 0 \text{ следует } g(\mathbf{x}) \equiv 0.$$

Указание. Построить выражение $\langle \psi^+(\mathbf{x}')\Phi_0 | I \rangle$.

3. Показать, что если подставить (13.26) во *вторично квантованное уравнение Шредингера* $H\Phi = E\Phi$, причем H определено в (13.30), то получится уравнение Шредингера для двух частиц в «конфигурационном пространстве» (13.31).

4. Доказать (13.37).

Указание. Подставить (13.11) в левую часть уравнения (13.37) и последовательно применить (13.36), что приводит к следующему результату:

$$\langle \Phi_0 | \dots a_{\mu}^{n_{\mu}} \dots a_2^{n_2} a_1^{n_1} (a_1^+)^{m_1} \times \\ \times (a_2^+)^{m_2} \dots (a_{\mu}^+)^{m_{\mu}} \dots \Phi_0 \rangle$$

Рис. 23. Пример функции состояния $\Phi_{\{n\}}$ (вверху) и функции состояния $\Phi_{\{m\}}$ (внизу).

(в качестве примера — рис. 23). Убедиться в следующем: если для некоторого μ число заполнения $m_{\mu} = 0$, а $n_{\mu} = 1$, то оператор a_{μ} можно «протащить» направо к Φ_0 , что дает $a_{\mu}\Phi_0 = 0$. Если же для некоторого μ число заполнения $m_{\mu} = 1$, а $n_{\mu} = 0$, то оператор a_{μ}^+ можно «протащить» налево: $\langle \Phi_0 | a_{\mu}^+ \dots \rangle$, а затем с помощью (13.35) преобразовать к виду $\langle \underbrace{a_{\mu}\Phi_0}_{=0} | \dots \rangle$, что дает в результате

нуль. Почему справедлив результат $\langle \Phi_{\{n\}} | \Phi_{\{m\}} \rangle = 1?$

5. Показать для $\Phi_{\{n\}} = \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_N}$, что

$$\langle \Phi_{\{n\}} | a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu} | \Phi_{\{n\}} \rangle = \begin{cases} 0 & \text{для } \mu \neq \nu, \\ n_{\mu} & \text{для } \mu = \nu. \end{cases} \quad (\text{A } 13.1)$$

6. Вычислить среднее значение оператора потенциальной энергии

$$V_{\text{оп}} = \int \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3x \quad (\text{A } 13.2)$$

для

$$\Phi = a_{\mu_1}^{\dagger} \Phi_0, \quad \Phi = a_{\mu_1}^{\dagger} a_{\mu_2}^{\dagger} \Phi_0. \quad (\text{A } 13.3)$$

Указание. Подставить (A 13.3), (A 13.2) и (13.1) в $\langle \Phi | V_{\text{оп}} | \Phi \rangle$ и применить результат предыдущего задания 5.

§ 14. Об обращении с ферми-операторами

а) Можно ли перенести сюда наши приемы § 5? Теперь вместо рассмотренных в § 5 бозе-операторов b и b^{\dagger} мы займемся исследованием свойств ферми-операторов a и a^{\dagger} , удовлетворяющих следующим соотношениям:

$$aa^{\dagger} + a^{\dagger}a = 1, \quad (14.1)$$

$$(a^{\dagger})^2 = 0, \quad (14.2)$$

$$a^2 = 0. \quad (14.3)$$

Хотя перестановочное соотношение (14.1) отличается от соответствующего соотношения для бозе-операторов только лишь знаком, это изменение знака приводит к существенным последствиям для свойств операторов a . Легко убедиться, например, что операторы $a + \alpha$ и $a^{\dagger} + \alpha$ более не удовлетворяют перестановочным соотношениям для ферми-операторов. Можно также сразу установить, что все степени операторов a^{\dagger} и a выше 1 исчезают

$$(a^{\dagger})^n = 0 \quad \text{для } n \geq 2, \quad (14.4)$$

$$a^n = 0 \quad \text{для } n \geq 2. \quad (14.5)$$

Если мы рассмотрим комбинацию волновых функций вида

$$c_0 \Phi_0 + c_1 a^{\dagger} \Phi_0 = f(a^{\dagger}) \Phi_0, \quad (14.6)$$

то обнаружим, что эта комбинация является уже полной. Тем не менее формально можно определить функции операторов a^{\dagger} и a . В качестве примера мы можем, конечно, представить выражение

$$f(a^{\dagger}) = c_0 \left(1 + \frac{c_1}{c_0} a^{\dagger} \right) \quad (14.7)$$

в виде экспоненциальной функции

$$f(a^+) = c_0 \exp\left(\frac{c_1}{c_0} a^+\right). \quad (14.8)$$

Нужно лишь иметь в виду, что разложение этой экспоненты в ряд по степеням оператора a^+ должно обрываться на втором члене.

Теперь посмотрим, как можно было бы провести преобразования с применением экспоненциальной функции (14.8). Для этого разложим в левой части выражения

$$e^{-\alpha a^+} a e^{\alpha a^+} = \tilde{a} \quad (14.9)$$

(которое мы кратко обозначили через \tilde{a}) обе экспоненциальные функции, откуда сразу получим

$$\tilde{a} = (1 - \alpha a^+) a (1 + \alpha a^+). \quad (14.10)$$

Если теперь перемножить учитывая точный порядок следования множителей, скобки и применить еще перестановочные соотношения (14.1), то сразу получим

$$\tilde{a} = a - \alpha^2 a^+ + \alpha (a a^+ - a^+ a). \quad (14.11)$$

В последующем изложении последний член в (14.11) будет нам еще часто встречаться. Поэтому мы введем особое сокращенное обозначение

$$s = \frac{1}{2} (a a^+ - a^+ a). \quad (14.12)$$

Соответствующим образом можно вычислить и выражение

$$a^+ = e^{-\alpha a} a e^{\alpha a}. \quad (14.13)$$

Тогда, принимая во внимание сокращенное обозначение (14.12), сразу получаем конечный результат

$$\tilde{a}^+ = a^+ - \alpha^2 a - 2\alpha s. \quad (14.14)$$

Аналогия с бозе-операторами будет существенно более близкой, если в показателе степени экспоненты стоит произведение $a^+ a$. Если разложить экспоненциальную функцию

$$e^{\alpha a^+ a} \quad (14.15)$$

в ряд по степеням $a^+ a$, то окажется, что операторы рождения и уничтожения все время чередуются, так что правила (14.4) и

(14.5) более неприменимы. Рассмотрим теперь, что означает преобразование¹⁾

$$\tilde{a} = f(\alpha) = e^{+\alpha a^+ a} a e^{-\alpha a^+ a}. \quad (14.16)$$

Для этого продифференцируем функцию $f(\alpha)$ по α , что дает

$$f'(\alpha) = e^{+\alpha a^+ a} (a^+ a a - a a^+ a) e^{-\alpha a^+ a}. \quad (14.17)$$

Первый член суммы в скобках ввиду (14.3) исчезает. Ко второму члену применим перестановочное соотношение (14.1), в результате чего выпадает еще одно произведение операторов

$$f'(\alpha) = e^{\alpha a^+ a} (-a) e^{-\alpha a^+ a} \equiv -f(\alpha). \quad (14.18)$$

Отсюда получаем дифференциальное уравнение для f :

$$f'(\alpha) = -f(\alpha), \quad (14.19)$$

решением которого является

$$f(\alpha) = e^{-\alpha} a, \quad (14.20)$$

причем мы приняли во внимание начальное условие $f(0) = a$. Отсюда окончательно получаем следующее соотношение:

$$\tilde{a} \equiv e^{\alpha a^+ a} a e^{-\alpha a^+ a} = e^{-\alpha} a. \quad (14.21)$$

Совершенно аналогичным образом получаем

$$\tilde{a}^+ \equiv e^{\alpha a^+ a} a^+ e^{-\alpha a^+ a} = e^{\alpha} a^+. \quad (14.22)$$

В последующем изложении соотношения (14.21) и (14.22) будут нам часто необходимы.

б) Смещенный ферми-осциллятор. Рассмотрим уравнение Шредингера так называемого смещенного ферми-осциллятора, которое формально имеет тот же вид, что и уравнение смещенного гармонического осциллятора:

$$\left\{ E_0 \frac{1}{2} (a^+ a - a a^+) + \gamma^* a^+ + \gamma a \right\} \Phi = E \Phi. \quad (14.23)$$

Мы заменили лишь при этом выражение $E_0 a^+ a$ на $E_0 \frac{1}{2} (a^+ a - a a^+)$, что, как легко увидеть с помощью перестановочных соотношений (14.1), сводится лишь к сдвигу нуля энергии на величину $\frac{1}{2} E_0$.

¹⁾ В этом преобразовании оператор $e^{\alpha a^+ a}$, вообще говоря, унитарный, если α — чисто мнимое число. В этом случае $(\tilde{a})^+ = \tilde{a}^+$.

Однако эта замена приводит к весьма симметричному рассмотрению проблемы. Для решения (14.23) возьмем волновую функцию Φ в виде полной комбинации волновых функций основного и возбужденного состояний:

$$\Phi = c_0 \Phi_0 + c_1 a^+ \Phi_0. \quad (14.24)$$

Если подставить (14.24) в (14.23), то мы получим с учетом соотношений (14.1) и (14.3) и того обстоятельства, что Φ_0 является основным состоянием и обладает свойством $a\Phi_0 = 0$, следующее уравнение:

$$E_0 \frac{1}{2} (c_1 a^+ \Phi_0 - c_0 \Phi_0) + \gamma^* c_0 a^+ \Phi_0 + \gamma c_1 \Phi_0 = E (c_0 \Phi_0 + c_1 a^+ \Phi_0). \quad (14.25)$$

Поскольку волновые функции основного и возбужденного состояний ортогональны, т. е. справедливы соотношения

$$\langle a^+ \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = 0, \quad \langle \Phi_0 | a^+ \Phi_0 \rangle = 0, \quad (14.26)$$

то уравнение (14.25) должно выполняться отдельно для коэффициентов при Φ_0 и $a^+ \Phi_0$. Это условие приводит к двум однородным уравнениям относительно c_0 и c_1 :

$$\left(-\frac{1}{2} E_0 - E\right) c_0 + \gamma c_1 = 0, \quad \gamma^* c_0 + \left(\frac{1}{2} E_0 - E\right) c_1 = 0. \quad (14.27)$$

Условие разрешимости, т. е. условие обращения в нуль детерминанта этой системы, приводит непосредственно к соотношению

$$E = \pm \sqrt{\left(\frac{E_0}{2}\right)^2 + |\gamma|^2}. \quad (14.28)$$

Отношение коэффициентов дается следующими выражениями:

$$\left| \frac{c_1}{c_0} = \frac{1}{2\gamma} \left\{ E_0 \pm \sqrt{E_0^2 + 4|\gamma|^2} \right\}, \quad \frac{c_0}{c_1} = \frac{1}{2\gamma^*} \left\{ -E_0 \pm \sqrt{E_0^2 + 4|\gamma|^2} \right\}, \right. \quad (14.29)$$

в) Много ферми-операторов.

1. Линейные преобразования. Рассмотрим набор ферми-операторов, удовлетворяющих перестановочным соотношениям

$$a_k a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k = \delta_{kk'}, \quad (14.30)$$

$$a_k a_{k'} + a_{k'} a_k = 0, \quad (14.31)$$

$$a_k^+ a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k^+ = 0. \quad (14.32)$$

Составим линейную комбинацию следующего вида:

$$A_j = \sum_k c_{jk} a_k, \quad (14.33)$$

$$A_j^+ = \sum_k c_{jk}^* a_k^+, \quad (14.34)$$

причем считается, что матрица коэффициентов c_{jk} унитарна. Мы утверждаем, что тогда имеют место следующие соотношения:

$$A_j A_{j'} + A_{j'} A_j = 0, \quad (14.35)$$

$$A_j A_{j'}^+ + A_{j'}^+ A_j = \delta_{jj'}, \quad (14.36)$$

а также сопряженное (14.35) соотношение. Если подставить в (14.35) выражения (14.33), то мы непосредственно получим

$$\sum_{kk'} c_{jk} c_{j'k'} (a_k a_{k'} + a_{k'} a_k) = 0. \quad (14.37)$$

Выражения в скобках согласно (14.31) исчезают, что и доказывает справедливость соотношения (14.35). Для доказательства (14.36) заменим вновь операторы A и A^+ согласно (14.33) и (14.34) на операторы a_k и a_k^+ . Ввиду выполнения соотношения (14.30), левая часть сразу же принимает вид суммы по произведениям коэффициентов c для одинаковых k . На основании предполагаемой унитарности матрицы c (т. е. $c_{jk}^* = (c^{-1})_{kj} = (c^+)_{kj}$) непосредственно можно написать, что

$$\sum_k c_{jk} c_{j'k}^* = \delta_{jj'}. \quad (14.38)$$

С помощью этого преобразования оператор Гамильтона

$$H = \sum_{kk'} a_k^+ M_{kk'} a_k, \quad (14.39)$$

который, в общем, имеет недиагональный вид, можно сразу представить в диагональном виде

$$H = \sum_j m_j A_j^+ A_j, \quad (14.40)$$

причем m_j являются действительными собственными значениями матрицы $M_{kk'}$, которая по предположению эрмитова.

2. Преобразование Боголюбова. До сих пор нами рассматривались только комбинации операторов рождения или уничтожения. Преобразование Боголюбова исследует смешанное преобразование. Рассмотрим две пары операторов a_1 , a_1^+ и a_2 , a_2^+ . Преобразование Боголюбова определяется тогда соотношениями

$$\left| \begin{array}{l} \tilde{a}_1^+ = a_1^+ u - a_2 v, \quad \tilde{a}_1 = a_1 u^* - a_2^+ v^*, \\ \tilde{a}_2^+ = a_1^+ v + a_2 u, \quad \tilde{a}_2 = a_1 v^* + a_2^+ u^* \end{array} \right. \quad (14.41)$$

$$\left| \begin{array}{l} \tilde{a}_1^+ = a_1^+ u - a_2 v, \quad \tilde{a}_1 = a_1 u^* - a_2^+ v^*, \\ \tilde{a}_2^+ = a_1^+ v + a_2 u, \quad \tilde{a}_2 = a_1 v^* + a_2^+ u^* \end{array} \right. \quad (14.42)$$

с дополнительными условиями

$$|u|^2 + |v|^2 = 1, \quad uv^* - vu^* = 0. \quad (14.43)$$

Легко установить, что новые операторы $\tilde{a}_1^+, \tilde{a}_1, \tilde{a}_2^+, \tilde{a}_2$ вновь удовлетворяют соотношениям (14.1—14.3). Например, для $(\tilde{a}_1^+)^2$ мы получаем следующее соотношение:

$$(\tilde{a}_1^+)^2 = (a_1^+)^2 u^2 - uv(a_1^+ a_2 + a_2 a_1^+) + a_2^2 v^2 = 0. \quad (14.44)$$

То же самое можно установить и для $(\tilde{a}_1^-)^2$, $(\tilde{a}_2^-)^2$ и $(\tilde{a}_2^+)^2$. Если в выражение

$$\tilde{a}_1^+ \tilde{a}_2 + \tilde{a}_2 \tilde{a}_1^+ \quad (14.45)$$

подставить правые части (14.41) и (14.42), то симметричные произведения оказываются равными нулю, поскольку оператор a_j^+ никогда не стоит за оператором a_j .

Рассмотрим, наконец, еще выражение

$$\tilde{a}_1^+ \tilde{a}_1 + \tilde{a}_1 \tilde{a}_1^+, \quad (14.46)$$

в которое мы вновь подставим правые части (14.41) и (14.42). Тогда получаем

$$[a_1^+, a_1]_+ |u|^2 - [a_2, a_1]_+ u^* v - [a_1^+, a_2^+]_+ uv^* + [a_2, a_2^+]_+ |v|^2, \quad (14.47)$$

где квадратные скобки обозначают симметризованные произведения, т. е. определены следующим образом:

$$[A, B]_+ = AB + BA. \quad (14.48)$$

Первое и последнее симметризованные произведения дают, при определенных обстоятельствах, 1, в то время как остальные члены исчезают. Используя дополнительное условие (14.43), получаем, наконец, соотношение

$$\tilde{a}_1^+ \tilde{a}_1 + \tilde{a}_1 \tilde{a}_1^+ = 1. \quad (14.49)$$

Теперь покажем, что преобразование Боголюбова можно построить с помощью некоторого унитарного преобразования. Эта связь, как мы увидим позже, оказывается очень важной для установления полной эквивалентности поначалу формально различных теорий сверхпроводимости Бардина, Купера и Шриффера и Боголюбова.

3. Представление преобразования Боголюбова с помощью унитарного преобразования¹⁾. Аналогия со смещенным гармоническим осциллято-

¹⁾ Этот раздел требует несколько более глубокой подготовки и при первом чтении может быть опущен.

ром. Рассмотрим комбинацию вакуумного состояния Φ_0 с функцией, описывающей рождение двух частиц в состояниях (1) и (2):

$$\Phi = (u + va_1^+ a_2^+) \Phi_0. \quad (14.50)$$

Операторное выражение, стоящее перед Φ_0 , формально можно записать в виде экспоненциальной функции, поскольку все степени выше первого порядка по $a_1^+ a_2^+$ исчезают:

$$\Phi = N e^{ca_1^+ a_2^+} \Phi_0. \quad (14.51)$$

Величины N и c определены здесь следующим образом:

$$N = u, \quad c = v/u. \quad (14.52)$$

Введем для произведения пары операторов $a_1^+ a_2^+$ сокращение

$$a_1^+ a_2^+ = A^+ \quad (14.53)$$

и зададимся теперь вопросом, нельзя ли таким же способом, как и для бозе-операторов (см. § 5), превратить оператор

$$N e^{cA^+} \quad (14.54)$$

в унитарный оператор. Сделаем для этого в виде пробы подстановку

$$\Phi = N e^{cA^+} \Phi_0 = e^{cA^+ - c^* A} \Phi_0, \quad A^+ = a_1^+ a_2^+, \quad (14.55)$$

где стоящее в правой части уравнения (14.55) экспоненциальное выражение должно быть искомым унитарным оператором. Как мы сейчас установим, этот оператор действительно обладает свойством унитарности. Однако мы еще не знаем, выполняется ли в действительности соотношение (14.55). Поэтому исследуем разложение экспоненты

$$U = e^{cA^+ - c^* A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (cA^+ - c^* A)^n, \quad (14.56)$$

широко используя перестановочные соотношения для ферми-операторов. С их помощью сразу доказываются нижеследующие результаты:

$$[A, A^+]_- = 1 - a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2, \quad (14.57)$$

$$A^2 = A^{+2} = 0, \quad (14.58)$$

$$A^+ A A^+ = A^+, \quad (14.59a)$$

$$A A^+ A = A. \quad (14.59b)$$

Исходя из (14.59а, б) и применяя метод математической индукции, легко показать, что

$$\left. \begin{aligned} (A^+A)^n &= A^+A \\ (AA^+)^n &= AA^+ \end{aligned} \right\} \text{для } n \geq 1, \quad (14.60a)$$

$$(14.60б)$$

Вычислим теперь степени $(cA^+ - c^*A)^n$, обращая особое внимание на порядок следования A^+ и A . Ввиду (14.58) остаются только такие члены, в которых A и A^+ попеременно следуют друг за другом. При этом следует различать случаи n четного и n нечетного:

а) n четное

$$(cA^+ - c^*A)^n = (-1)^{\frac{n}{2}} \left(\underbrace{A^+AA^+A \dots A^+A}_{n \text{ раз}} |c|^n + \underbrace{AA^+ \dots AA^+}_{n \text{ раз}} |c|^n \right); \quad (14.61a)$$

б) n нечетное

$$\begin{aligned} (cA^+ - c^*A)^n &= (-1)^{\frac{n-1}{2}} \left(\underbrace{A^+AA^+ \dots AA^+}_{n \text{ раз}} |c|^{n-1} c - \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{AA^+A \dots A^+A}_{n \text{ раз}} |c|^{n-1} c^* \right). \end{aligned} \quad (14.61б)$$

Выражения (14.61а, б) при учете (14.59а, б) и (14.60а, б) упрощаются:

$$(cA^+ - c^*A)^n = (-1)^{\frac{n}{2}} |c|^n (A^+A + AA^+) \quad n \text{ четное}, \quad (14.62a)$$

$$(cA^+ - c^*A)^n = (-1)^{\frac{n-1}{2}} |c|^{n-1} (cA^+ - c^*A) \quad n \text{ нечетное}. \quad (14.62б)$$

Подставим (14.62а) и (14.62б) в (14.56). Для различения четных и нечетных n положим $n = 2m$ или $n = 2m + 1$. Тогда получим

$$\begin{aligned} U &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} |c|^{2m} (AA^+ + A^+A) + \\ &\quad + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m+1)!} |c|^{2m} (cA^+ - c^*A). \end{aligned}$$

Операторные выражения не зависят от индекса суммирования, поэтому их можно вынести за знаки сумм. Тогда оказывается,

что эти суммы по существу представляют собой разложения синуса и косинуса. Следовательно,

$$U = 1 - \left(A \frac{c^*}{|c|} - \frac{c}{|c|} A^+ \right) \sin |c| + (AA^+ + A^+A) (\cos |c| - 1). \quad (14.63)$$

Вспомним теперь нашу исходную задачу. Мы хотели показать, что соотношение (14.55) действительно имеет место, причем левая часть (14.55) тождественна левой части (14.50). Подействуем теперь правой частью (14.63) на Φ_0 и учтем, что ввиду (14.57) $(1 - (AA^+ + A^+A))\Phi_0 = 0$ и что $a_j\Phi_0 = 0$. Отсюда получаем

$$U\Phi_0 = \left(\cos |c| + \frac{c}{|c|} \sin |c| A^+ \right) \Phi_0.$$

Сравнивая это выражение с левой частью (14.50):

$$(u + vA^+)\Phi_0, \quad (14.64)$$

сразу же получаем основополагающие соотношения

$$\cos |c| = u, \quad (14.65)$$

$$\frac{c}{|c|} \sin |c| = v. \quad (14.66)$$

В последующем изложении будем считать, что постоянная c действительна. Тогда (14.65) и (14.66) можно заменить на

$$\cos c = u, \quad (14.67)$$

$$\sin c = v. \quad (14.68)$$

Обратимся теперь снова к аналогии со смещенным гармоническим осциллятором. В § 6 было показано, что свойства операторов, действующих на возбужденные состояния, можно легко найти, если известно, как эти операторы преобразуются при унитарном преобразовании. При этом речь идет именно о тех унитарных преобразованиях, которые связывают старое состояние с новым основным состоянием. Вычислим выражение

$$f_1(c) = Ua_1^+U^+, \quad (14.69)$$

где U имеет следующий вид:

$$U = e^{cA^+ - cA}. \quad (14.70)$$

Для этого продифференцируем (14.69) по c и получим

$$\begin{aligned} \frac{d}{dc} (Ua_1^+U^+) &= U \{ (A^+ - A) a_1^+ - a_1^+ (A^+ - A) \} U^+ = \\ &= -U [A, a_1^+] U^+. \end{aligned} \quad (14.71)$$

Исходя из перестановочных соотношений, легко проверить, что справедливо равенство

$$a_2 a_1 a_1^+ - a_1^+ a_2 a_1 = a_2, \quad (14.72)$$

в результате чего (14.71) переходит в

$$- U a_2 U^+. \quad (14.73)$$

Теперь мы должны, однако, вычислить еще (14.73). Соответственно вышеизложенному получаем уравнение

$$\frac{d}{dc} (U a_2 U^+) = U [A^+, a_2] U^+ = U a_1^+ U^+. \quad (14.74)$$

Если подставить (14.74) в (14.71) и учесть при этом (14.69), то получится дифференциальное уравнение для f_1 следующего вида:

$$f_1'' + f_1 = 0. \quad (14.75)$$

Учитывая начальные условия $f_1(0) = a_1^+$, $f_1'(0) = -a_2$, сразу получаем решение вида

$$U a_1^+ U^+ \equiv f_1 = a_1^+ \cos c - a_2 \sin c. \quad (14.76)$$

Поскольку $\cos c$ и $\sin c$ связаны с u и v соотношениями (14.67) и (14.68), мы получаем, наконец, окончательный результат

$$| \tilde{a}_1^+ \equiv U a_1^+ U^+ = a_1^+ u - a_2 v. \quad (14.77)$$

Тем самым одновременно определен новый оператор \tilde{a}_1^+ , который получен преобразованием оператора a_1^+ . Аналогичным образом получается результат

$$| \tilde{a}_2 \equiv U a_2 U^+ = u a_2 + v a_1^+. \quad (14.78)$$

Этот результат показывает, что преобразование Боголюбова действительно может быть генерировано унитарным преобразованием U (см. (14.70)). Как уже было отмечено, это обстоятельство окажется чрезвычайно полезным в теории сверхпроводимости.

Задания к § 14

Приложения смещенного фермиевского осциллятора:

а) Спин 1/2 в магнитном поле. Положить

$$a^+ = \sigma^+, \quad a = \sigma^-, \quad \sigma_z = \frac{1}{2} (a^+ a - a a^+) \quad (A14.1)$$

и показать, что справедливы следующие перестановочные соот-

ношения:

$$\begin{aligned} \sigma^{+2} = \sigma^{-2} = 0, \quad \sigma^+ \sigma^- + \sigma^- \sigma^+ = 1, \\ \sigma^+ \sigma^- - \sigma^- \sigma^+ = 2\sigma_z, \quad \sigma^\pm \sigma_z - \sigma_z \sigma^\pm = \mp \sigma^\pm. \end{aligned} \quad (\text{A14.2})$$

Положим $\sigma^\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$, а также $s_j = \hbar \sigma_j$, $j = x, y, z$. Тогда получаем оператор спина $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ для спина 1/2. С помощью (A14.2) показать, что компоненты \mathbf{s} удовлетворяют перестановочным соотношениям для момента количества движения:

$$s_x s_y - s_y s_x = i\hbar s_z,$$

$$s_y s_z - s_z s_y = i\hbar s_x,$$

$$s_z s_x - s_x s_z = i\hbar s_y.$$

Уравнение Шредингера для волновой функции ψ спина 1/2 в магнитном поле \mathbf{H} имеет вид

$$\frac{e}{mc} (\mathbf{H}, \mathbf{s}) \psi = i\hbar \dot{\psi}. \quad (\text{A14.3})$$

Показать, что левая часть (A14.3) эквивалентна (14.23), и определить E_0 , γ^* , γ .

б) *Двухуровневый атом во внешнем электрическом поле.* Пусть имеется атом только с двумя состояниями $\mu = 1, 2$ и одним электроном. Положить в уравнении (13.9) $V(\mathbf{x}) = V_0(\mathbf{x}) + V_s(\mathbf{x})$, где $V_0(\mathbf{x})$ — потенциальная энергия электрона, а энергия $V_s(\mathbf{x})$ вызвана внешним возмущением. Пусть $\varphi_\mu(\mathbf{x})$ в (13.1, 1а) — решение уравнения Шредингера (13.16) с $V(\mathbf{x}) = V_0(\mathbf{x})$. Какой вид имеет оператор Гамильтона с учетом энергии возмущения $V_s(\mathbf{x})$, в представлении вторичного квантования в операторах a_μ^\pm , a_μ ? Положить $a_2^+ a_1 = a^+$, $a_1^+ a_2 = a$ и показать, что при соответствующем выборе постоянных получившееся таким образом уравнение Шредингера согласуется с уравнением (14.23).

§ 15. Взаимодействие между полями: электроны, «танцующие на канате»

В § 12 мы уже видели на примере кулоновского взаимодействия, что поле может взаимодействовать само с собой. Как в физике твердого тела, так и, например, в ядерной физике часто приходится иметь дело с взаимодействием между различными полями. Например, электроны в твердом теле взаимодействуют с колебаниями решетки или с квантованным полем излучения.

Для того чтобы показать, как можно было бы рассматривать такого рода взаимодействия, мы займемся сейчас одним весьма наглядным примером. Мы рассмотрим струну («канат»), вдоль

которой могут перемещаться частицы (например, электроны), причем на частицы действует поле силы тяжести. Воздействием силы тяжести на струну мы пренебрежем. Таким образом, в нашей задаче речь идет в прямом смысле слова о «танцующих на канате» электронах (рис. 24). Для проведения квантования связанной системы мы используем уже хорошо знакомый нам путь:

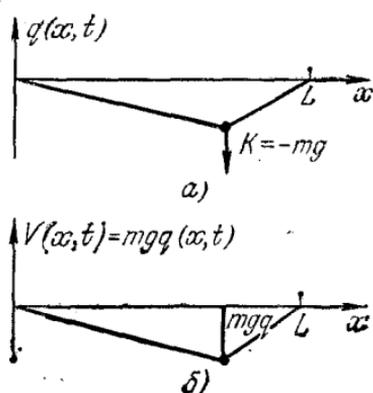


Рис. 24. Взаимодействие точечной массы со струной. а) Отклонение $q(x, t)$ струны как функция координаты в заданный момент времени. б) Потенциальная энергия $V(x, t)$ электрона (точечной массы) в точке x струны.

- а) построение уравнений движения;
- б) построение функции Лагранжа, уравнения Лагранжа для которой вновь приводят к уравнению движения;
- в) переход к функции Гамильтона;
- г) квантование;
- д) разложение по собственным функциям.

а) **Построение уравнений движения.** Уравнение колебаний неподверженной действию внешней силы струны имеет следующий вид:

$$\rho \ddot{q}(x, t) - s \frac{\partial^2 q(x, t)}{\partial x^2} = 0; \quad (15.1)$$

здесь ρ — плотность массы, q — поперечное смещение в точке x в момент времени t , s — натяжение струны.

Если на струну поместить частицу с массой m , струна будет провисать под действием силы тяжести

$$K = -mg; \quad (15.2)$$

здесь m — масса частицы (электрона), а g — ускорение свободного падения. Поскольку уравнение (15.1) в левой части содержит плотность массы, то это — уравнение движения плотности массы. Поэтому, если мы хотим ввести в (15.1) вынуждающую силу, то (15.2) следует поделить на dx , а затем совершить предельный переход и перейти к плотности силы. Если представить себе, находясь полностью в рамках полевого представления, что электрон «размазан» и соответственно этому его плотность массы задается функцией $\rho_{эл}(x, t)$, то плотность силы будет определяться выражением

$$\tilde{K} = -\rho_{эл}(x, t)g. \quad (15.3)$$

Желая проквантовать уравнение Шредингера, мы предположим, что электрон уже первично квантован и описывается волновой

функцией. Тогда плотность массы электрона задается выражением

$$\rho_{эл}(x, t) = m\psi^+(x)\psi(x). \quad (15.4)$$

Если ввести в (15.1) плотность силы, определяемую выражениями (15.3) и (15.4), то получится следующее уравнение вынужденных колебаний струны:

$$\rho\ddot{q}(x, t) - s \frac{\partial^2 q(x, t)}{\partial x^2} = -mg\psi^+(x)\psi(x). \quad (15.5)$$

Теперь рассмотрим уравнение движения электрона или, точнее сказать, волнового поля электрона, которое идентично обычному уравнению Шредингера для одной частицы. Изменение потенциальной энергии частицы в поле силы тяжести прямо пропорционально отклонению струны q , умноженному на вес частицы G . По определению

$$G = mg. \quad (15.6)$$

Потенциал, который мы должны подставить в уравнение Шредингера, таким образом, имеет вид

$$V(x, t) = mgq(x, t). \quad (15.7)$$

Тем самым по отклонению $q(x, t)$ можно непосредственно судить о величине потенциальной энергии электрона. Соответствующее обычное уравнение Шредингера имеет вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + Gq(x, t) \right\} \psi(x, t) = i\hbar \dot{\psi}(x, t). \quad (15.8)$$

Установив уравнения (15.5) и (15.8), мы получили, таким образом, уравнения движения полей $q(x, t)$ и $\psi(x, t)$.

б) Функция Лагранжа. Функция Лагранжа для свободно колеблющейся струны уже встречалась нам в § 9, а функция Лагранжа электронного поля с заданным потенциалом представлена уравнением (12.3). Попытаемся представить функцию Лагранжа нашей задачи в виде суммы отдельных вкладов, что приводит к результату

$$L = \int \psi^*(x, t) \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} \psi(x, t) dx + \frac{1}{2} \int (\rho\dot{q}^2(x, t) - s \left(\frac{\partial q(x, t)}{\partial x} \right)^2) dx - \int Gq(x, t) \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx. \quad (15.9)$$

Поначалу может показаться удивительным, что здесь через потенциальное поле (15.7) учитывается воздействие струны на электрон, а не наоборот — воздействие вынуждающей силы, стоя-

щей в (15.5), на струну. Но если теперь с помощью функции Лагранжа (15.9) ввести обычные уравнения движения Лагранжа, то мы придем не только к уравнению (15.8), но также и к полному уравнению (15.5). Ввиду этого функция Лагранжа (15.9) дает правильное выражение для вынуждающей силы в (15.5).

в) Построение функции Гамильтона. Для того чтобы построить функцию Гамильтона, нам нужны канонически сопряженные импульсы, которые можно получить из функции Лагранжа с помощью дифференцирования по q и ψ :

$$\pi_\psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}, \quad \pi_q = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}.$$

Решение проводится точно так же, как в §§ 9 и 12, так что можно сразу воспользоваться полученными там выражениями. Из общего выражения для H :

$$H = \int \pi_\psi \dot{\psi} dx + \int \pi_q \dot{q} dx - L \quad (15.10)$$

непосредственно получаем

$$\begin{aligned} \dot{H} = \int \psi^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\} \psi(x) dx + \frac{1}{2\rho} \int \pi_q^2(x) dx + \\ + \frac{s}{2} \int \left(\frac{\partial q(x)}{\partial x} \right)^2 dx + \int Gq(x) \psi^*(x) \psi(x) dx. \end{aligned} \quad (15.11)$$

Объединив первый и последний интегралы, можно увидеть, что это есть не что иное, как среднее значение энергии электрона в потенциальном поле $-Gq(x)$, а второй интеграл представляет просто энергию свободно колеблющейся струны. Отсюда мы получаем важное правило построения функции Гамильтона такого рода систем с взаимодействием: нужно взять полную функцию Гамильтона частицы и добавить к ней функцию Гамильтона свободно колеблющегося поля.

г) Квантование. Для того чтобы прийти к квантованию, следует подчинить функции $\pi_\psi \equiv -(\hbar/i)\psi^+$ и ψ тем же, что и раньше, перестановочным соотношениям, т. е. перестановочным соотношениям для ферми-частиц (13.8). Далее следует подчинить π_q и q перестановочным бозе-соотношениям, которые справедливы для колебаний решетки или колебаний струны. Поскольку ψ^+ , ψ и π_q , q относятся к различным системам, далее следует потребовать, чтобы пары операторов различных систем между собой коммутировали:

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} [\psi^+(x), \pi_q(x')] &= 0, & [\psi(x), \pi_q(x')] &= 0, \\ [\psi^+(x), q(x')] &= 0, & [\psi(x), q(x')] &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (15.12)$$

Это правило можно заимствовать из обычной теории Шредингера для системы многих частиц или аксиоматически положить в основу рассмотрения проблемы взаимодействия.

д) **Разложение по собственным функциям.** Последний шаг мы делаем, также основываясь на далеко идущей аналогии с рассуждениями предыдущих параграфов. Там было проведено разложение по собственным функциям как отклонений решетки $q(x)$, так и волновой функции электрона. Поскольку проблема отыскания собственных функций оператора Гамильтона (15.11) чрезвычайно сложна и на самом деле является важнейшей задачей квантовой теории поля, не имеет смысла проводить разложение H по собственным функциям соответствующего классического уравнения.

Лучше обратиться к разложениям по собственным функциям несвязанных волновых уравнений. Итак, воспользуемся разложениями

$$\psi(x) = \sum_k a_k \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikh}, \quad \psi^+(x) = \sum_k a_k^+ \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikh}, \quad (15.13)$$

$$q(x) = \sum_w \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w}} \frac{1}{\sqrt{L}} (e^{iwx} b_w + e^{-iwx} b_w^+). \quad (15.14)$$

Перестановочные соотношения между операторами a_k и a_k^+ , а также b_w и b_w^+ те же самые, что и раньше (см. (13.4—13.6), (10.18)). Из (15.12), напротив, сразу следует, что операторы обеих систем между собой коммутируют:

$$[a_k, b_w] = [a_k, b_w^+] = [a_k^+, b_w] = [a_k^+, b_w^+] = 0. \quad (15.15)$$

Теперь обозначим кратко в (15.11) отдельные интегралы в порядке их следования через $H_{0,эл}$, $H_{0,р}$, $H_{вз}$, после чего оператор Гамильтона примет следующий общий вид:

$$H = H_{0,эл} + H_{0,р} + H_{вз}. \quad (15.16)$$

Если теперь ввести разложения (15.13) и (15.14) в соответствующие выражения в (15.11) и (15.16), то для первых двух членов мы получим уже хорошо известные нам выражения

$$H_{0,эл} = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^+ a_k, \quad (15.17)$$

$$H_{0,р} = \sum_w \hbar \omega_w b_w^+ b_w. \quad (15.18)$$

В последующем изложении мы будем очень часто применять

следующее сокращенное обозначение:

$$H_0 \equiv H_{0,эл} + H_{0,р} \equiv \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^+ a_k + \sum_w \hbar \omega_w b_w^+ b_w, \quad (15.19)$$

$$\hbar \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Новым является для нас вычисление оператора Гамильтона взаимодействия $H_{вз}$, который после подстановки разложений (15.13) и (15.14) принимает следующий вид:

$$H_{вз} = G \int \sum_w \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_w}} \frac{1}{\sqrt{L}} (b_w + b_w^+) e^{i\omega x} \times \\ \times \sum_k a_k^+ \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikx} \sum_{k'} a_{k'} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik'x} dx. \quad (15.20)$$

Для дальнейшего вычисления вынесем все выражения, по которым не проводится интегрирование, за знак интеграла. Тогда перед интегралом получаем суммы по w , k , k' , а также произведения операторов $b_w + b_w^+$ и a_k^+ , $a_{k'}$. Далее, наконец, стоят числовые множители и сам интеграл. Это последнее произведение обозначим кратко через $\hbar G_{kk'w}$. Тогда $H_{вз}$ принимает вид

$$H_{вз} = \sum_{w,k,k'} (b_w + b_w^+) a_k^+ a_{k'} \hbar G_{kk'w}. \quad (15.21)$$

Явное выражение для $G_{kk'w}$ имеет следующий вид:

$$G_{kk'w} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\rho\omega_w}} L^{-3/2} \int_0^L e^{i(w-k+k')x} dx. \quad (15.22)$$

Поскольку интеграл по x является символом Кронекера, выражение (15.22) принимает вид

$$G_{kk'w} = \sqrt{\frac{1}{\hbar 2\rho\omega_w}} \frac{1}{\sqrt{L}} \delta_{k,k'+w}. \quad (15.23)$$

Для этого выражения в свою очередь введем сокращенное обозначение

$$G_{kk'w} = g_w \delta_{k,k'+w}. \quad (15.24)$$

После этих преобразований мы можем теперь выписать выражения для полного гамильтониана. Оно имеет вид

$$H = H_0 + H_{вз} = \hbar \left(\sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \sum_w \omega_w b_w^+ b_w + \right. \\ \left. + \sum_{k,w} (a_k^+ b_w^+ a_{k+w} g_w^* + a_{k+w}^+ a_k b_w g_w) \right). \quad (15.25)$$

При этом мы сразу учли символ Кронекера (15.24). В последующем изложении будет использоваться сокращенное обозначение, указанное в выражении (15.25):

$$H_0 = H_{0, \text{эл}} + H_{0, \text{р}}. \quad (15.26)$$

Как мы увидим позже, выражения, которые будут получены для случая взаимодействия между электронами и колебаниями решетки, а также для взаимодействия между электронами и светом, имеют очень похожую, если не тождественную структуру. Выражение (15.25) является основой для многих исследований взаимодействующих полей, и на протяжении книги мы познакомимся с целым рядом методов решения соответствующего гамильтониану (15.25) уравнения Шредингера.

Примечание. Построение средних значений и матричных элементов делается, как и раньше (§ 4 и § 13), с помощью приведенных там правил.

Задания к § 15

1. Исключаем связь между полями и ищем решения уравнения Шредингера

$$H_0 \Phi \equiv \left\{ \sum_k \hbar \varepsilon_k a_k^+ a_k + \sum_w \hbar \omega_w b_w^+ b_w \right\} \Phi = E \Phi. \quad (\text{A } 15.1)$$

Показать, что оно дается выражением

$$\Phi_{\{n_k, m_w\}} = \prod_k (a_k^+)^{n_k} \prod_w \frac{1}{\sqrt{m_w!}} (b_w^+)^{m_w} \Phi_0, \quad (\text{A } 15.2)$$

причем $n_j = 0, 1; m_j = 0, 1, 2, \dots$, и

$$a_k \Phi_0 = b_w \Phi_0 = 0 \quad \text{для всех } k, w. \quad (\text{A } 15.3)$$

Соответствующие собственные энергии имеют вид

$$E_{\{n_k, m_w\}} = \sum_k \hbar \varepsilon_k n_k + \sum_w \hbar \omega_w m_w. \quad (\text{A } 15.4)$$

Если индексам k и w сопоставить целые числа $1, 2, 3, \dots$, то выражение (A 15.2) принимает следующий явный вид:

$$\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, m_1, m_2, \dots} = \frac{1}{\sqrt{m_1! m_2! \dots}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots \times \\ \times \dots (b_1^+)^{m_1} (b_2^+)^{m_2} \dots \Phi_0.$$

Указание. Подставить (A 15.2) в (A 15.1) и применить перестановочные соотношения, а также (A 15.3).

2. Показать, что общее решение зависящего от времени уравнения Шредингера

$$H_0\Phi = i\hbar\dot{\Phi} \quad (\text{A } 15.5)$$

имеет следующий вид:

$$\Phi = \sum c_{\{n_k, m_w\}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\{n_k, m_w\}} t} \Phi_{\{n_k, m_w\}}. \quad (\text{A } 15.6)$$

Сумма берется по всем возможным комбинациям

$$(n_1, n_2, \dots; m_1, m_2, \dots) \text{ с } n_j = 0, 1; m_j = 0, 1, 2, \dots$$

Коэффициенты — любые.

Указание. Подставить (A 15.6) в соответствующее зависящее от времени уравнение (15.1) и учесть, что решение (A 15.2) является решением независящего от времени уравнения Шредингера.

3. Доказать, что

$$\begin{aligned} & \left\langle \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, m_1, \dots, m_w, \dots} \left| a_k^+ b_w \right| \Phi_{n'_1, n'_2, \dots, n'_k, \dots, m'_1, \dots, m'_w, \dots} \right\rangle = \\ & = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_k n'_k+1} \dots \delta_{m_1 m'_1} \dots \delta_{m_w m'_w-1} \dots \sqrt{m'_w}, \quad (\text{A } 15.7) \end{aligned}$$

а также, что

$$\begin{aligned} & \left\langle \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, m_1, \dots, m_w, \dots} \left| a_k b_w^+ \right| \Phi_{n'_1, n'_2, \dots, n'_k, \dots, m'_1, \dots, m'_w, \dots} \right\rangle = \\ & = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_k n'_k-1} \dots \delta_{m_1 m'_1} \dots \delta_{m_w m'_w+1} \dots \sqrt{m'_w + 1}. \quad (\text{A } 15.8) \end{aligned}$$

В (A 15.7) и (A 15.8) n и n' принимают значения лишь 0 или 1.

§ 16. Методические приемы: представление взаимодействия и представление Гейзенберга ¹⁾

а) Представление взаимодействия. В этом параграфе мы обсудим некоторые методические приемы, а именно, так называемые представление взаимодействия и представление Гейзенберга. Эти «представления» никоим образом не ограничены только квантовой теорией поля. Они появляются уже в обычной квантовой теории, однако мы не предполагаем здесь, что читатель знаком с ними.

¹⁾ Результаты этого параграфа будут использованы сначала в § 27, а затем, начиная с главы V.

Во многих практически важных случаях оператор Гамильтона можно разбить на две части:

1) одну часть H_0 , которая описывает движение свободных частиц, когда можно считать, что нам известны решения соответствующих уравнений Шредингера,

2) и другую часть, представляющую взаимодействие между одинаковыми или разными частицами: $H_{вз}$.

В этих обозначениях, следовательно, уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$| (H_0 + H_{вз})\Phi(t) = i\hbar\dot{\Phi}(t). \quad (16.1)$$

В этом представлении, которое называется *представлением Шредингера*, операторы не зависят от времени, а функция состояния Φ , напротив, зависит от времени. Кажется удобным упростить уравнение (16.1), используя то, что решение простого уравнения Шредингера

$$H_0\Phi^0(t) = i\hbar\dot{\Phi}^0(t) \quad (16.2)$$

уже известно. Для последующего достаточно даже, если это решение известно лишь формально. Запишем решение (16.2) в виде

$$\Phi^0(t) = U(t)\Phi^0(0), \quad (16.3)$$

где оператор $U(t)$, действуя на начальное состояние $\Phi^0(0)$, дает искомое решение $\Phi^0(t)$. Оператор U можно представить в виде следующей экспоненциальной функции:

$$| U = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}. \quad (16.4)$$

Доказательство того, что (16.3) вместе с (16.4) удовлетворяет уравнению (16.2), проводится, как в случае обычного дифференциального уравнения первого порядка, подстановкой экспоненциальной функции в уравнение и дифференцированием. Хотя H_0 является оператором, этот метод применим и здесь, поскольку H_0 коммутирует сам с собой и, следовательно, с (16.4). Для решения (16.1) мы сделаем совершенно аналогичную (16.3) замену в виде

$$| \Phi = U\tilde{\Phi}, \quad (16.5)$$

причем функция $\tilde{\Phi}$ еще неизвестна. Эта процедура является аналогом метода «вариации постоянной» в теории обычных дифференциальных уравнений. Если подставить (16.5) в (16.1), перемножить члены в левой части и выполнить дифференцирование в правой части, то сразу получаем

$$H_0U\tilde{\Phi} + H_{вз}U\tilde{\Phi} = H_0U\tilde{\Phi} + i\hbar U\dot{\tilde{\Phi}}. \quad (16.6)$$

Члены с H_0 в уравнении (16.6), очевидно, выпадают, а оставшиеся члены уравнения мы умножим слева на U^{-1} и введем краткое обозначение

$$| U^{-1}H_{вз}U = \tilde{H}_{вз}, \quad (16.7)$$

после чего окончательно получим уравнение следующего вида:

$$| \tilde{H}_{вз}\tilde{\Phi} = i\hbar\dot{\tilde{\Phi}}. \quad (16.8)$$

Новый оператор взаимодействия $\tilde{H}_{вз}$ содержит H_0 теперь в экспоненциальной функции (см. (16.4)), поэтому могло бы показаться, что проблема стала только существенно сложнее, поскольку ведь сначала нужно определить $\tilde{H}_{вз}$. На самом деле, однако, мы можем вычислить $\tilde{H}_{вз}$ очень просто. В качестве конкретного примера рассмотрим Гамильтониан $\tilde{H}_{вз}$, который встретился нам в предыдущем параграфе и который описывает взаимодействие между электронами и колебаниями. Типичный член суммы $\tilde{H}_{вз}$ (см. (15.21)) имеет вид

$$U^{-1}a_{\mathbf{k}}^+a_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{w}}U. \quad (16.9)$$

Преобразуем теперь (16.9) с помощью следующего приема: представим единичный оператор в несколько необычном виде

$$1 = U^{-1}U. \quad (16.10)$$

Тогда выражение (16.9) преобразуется к виду

$$(U^{-1}a_{\mathbf{k}}^+U)(U^{-1}a_{\mathbf{k}}U)(U^{-1}b_{\mathbf{w}}U). \quad (16.11)$$

Рассмотрим теперь подробно первый член

$$e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} a_{\mathbf{k}}^+ e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}. \quad (16.12)$$

Опираясь на рассмотренный в предыдущих параграфах пример, представим H_0 в виде суммы двух членов: электронного вклада и вклада от колебаний решетки

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \hbar\epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar\omega_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}}. \quad (16.13)$$

Поскольку электронные операторы коммутируют со всеми фоновыми операторами, то все фоновые операторы, встречающиеся в H_0 в (16.12), выпадают. Равным образом можно принять, что все операторы $a_{\mathbf{k}}^+$ коммутируют со всеми произведениями $a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$ для $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$, при этом сами операторы между собой антикоммутируют, но при двойной перестановке знак остается прежним.

Таким образом, наша задача состоит теперь в том, чтобы найти выражения вида

$$f(t) = e^{i\varepsilon_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} t} a_{\mathbf{k}'}^+ e^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'} t}. \quad (16.14)$$

Эта задача, однако, уже была решена в § 14:

$$U^{-1} a_{\mathbf{k}'}^+ U \equiv f(t) = e^{i\varepsilon_{\mathbf{k}'} t} a_{\mathbf{k}'}^+. \quad (16.15)$$

Остальные присутствующие в (16.11) члены могут быть определены совершенно аналогичным образом (см. §§ 14, 5). Таким образом, мы получаем

$$U^{-1} a_{\mathbf{k}} U = e^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}} t} a_{\mathbf{k}} \quad (16.16)$$

и

$$U^{-1} b_{\mathbf{w}} U = e^{-i\omega_{\mathbf{w}} t} b_{\mathbf{w}}. \quad (16.17)$$

Ради полноты добавим еще одно соотношение

$$U^{-1} b_{\mathbf{w}}^+ U = e^{i\omega_{\mathbf{w}} t} b_{\mathbf{w}}^+. \quad (16.18)$$

Из этого рассуждения становится очевидным, что все произведения операторов a , a^+ , b и b^+ можно, применив замены (16.15—16.18), простым образом перевести в представление взаимодействия. Для нашего конкретного примера оператор Гамильтона (15.25) переходит в следующий оператор Гамильтона в представлении взаимодействия:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{вз}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} & (\hbar g_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{w}} e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})t} + \\ & + \hbar g_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})t}). \end{aligned} \quad (16.19)$$

б) Представление Гейзенберга. В предыдущем разделе мы воспользовались формальной возможностью решить уравнение Шредингера с гамильтонианом H_0 . В представлении Гейзенберга мы пойдем еще дальше, формально решив уравнение Шредингера

$$| \quad H\Phi(t) = i\hbar\dot{\Phi}(t), \quad (16.20)$$

т. е. уравнение, относящееся ко всей проблеме в целом, включая взаимодействие, с помощью подстановки

$$| \quad \Phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} \Phi(0). \quad (16.21)$$

Разумеется, мы ничего не выигрываем, применив это формальное решение, поскольку явное вычисление оператора, представленного в виде экспоненциальной функции, в общем, сопряжено с

большими трудностями. Тем не менее подход (16.21) приводит к новому способу решения. Как нам известно из совершенно общих соображений, в квантовой теории в конечном счете имеет значение лишь сравнение измеренных величин со средними величинами, которые можно представить в виде

$$\langle \Phi | A | \Phi \rangle. \quad (16.22)$$

Если в (16.22) подставить функцию (16.21), то, учитывая определение среднего значения (16.22), получим выражение

$$\left| \left\langle \Phi(0) \left| e^{\frac{i}{\hbar} H t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \right| \Phi(0) \right\rangle \right. \quad (16.23)$$

При этом действие множителя $e^{-(i/\hbar)Ht}$ перенесено на A . Выражение (16.23) можно интерпретировать совершенно новым образом, а именно, что теперь следует вычислить среднее значение нового оператора

$$\left| e^{\frac{i}{\hbar} H t} A e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \hat{A}, \quad (16.24)$$

относящегося к начальной волновой функции $\Phi(0)$. В представлении Гейзенберга операторы зависят от времени, а функции состояния, напротив, от времени не зависят.

Для дальнейшего учтем, что для $A = H$ уравнение (16.24) принимает вид

$$\left| e^{\frac{i}{\hbar} H t} H e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = H = \hat{H}.$$

Поскольку начальные волновые функции конкретной физической проблемы задаются заранее, то задача состоит в том, чтобы найти поведение во времени оператора (16.24). Продифференцировав \hat{A} по времени, можно очень легко найти уравнение, которому удовлетворяет оператор \hat{A} . Тогда сразу получаем

$$\left| \frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} (H\hat{A} - \hat{A}H) \equiv \frac{i}{\hbar} [H, \hat{A}]. \quad (16.25)$$

Таким образом, уравнение (16.25) является уравнением движения операторов в представлении Гейзенберга. Ради простоты мы предположили, что оператор A явно от времени не зависит. Для вычисления коммутатора $[H, \hat{A}]$ в явном виде нам нужны перестановочные соотношения. Теперь мы покажем, что при переходе от представления Шредингера к представлению Гейзенберга перестановочные соотношения (для одного и того же момента времени) остаются в силе, если повсюду сделать замену $A \rightarrow \hat{A}$, $B \rightarrow \hat{B}$.

Для доказательства будем исходить из коммутатора

$$[A, B] = C \quad (16.26)$$

(A, B, C — операторы). Умножим это выражение слева на $e^{(i/\hbar)Ht}$, а справа — на $e^{-(i/\hbar)Ht}$. Тогда левая часть (16.26) примет вид

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} (AB - BA) e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} &\equiv \\ &\equiv e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} B e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} - e^{\frac{i}{\hbar}Ht} B e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \equiv \\ &\equiv \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} \equiv [\widehat{A}, \widehat{B}]. \quad (16.27) \end{aligned}$$

Правая часть непосредственно переходит в \widehat{C} , так что имеет место равенство

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{C}. \quad (16.28)$$

Тот же результат справедлив, естественно, и для плюс-переставочных соотношений.

Для пояснения уравнения (16.25) рассмотрим теперь конкретный пример.

Пример. Взаимодействие между колебаниями и электронами (см. § 15). В качестве величины A мы выберем оператор b^+ . В представлении Гейзенберга этот оператор становится оператором \widehat{b}^+ , который, согласно (16.25), удовлетворяет уравнению

$$\widehat{b}_w^+ = \frac{i}{\hbar} [(\widehat{H}_0 + \widehat{H}_{вз}), \widehat{b}_w^+]. \quad (16.29)$$

Каким образом следует получить входящие в это уравнение \widehat{H}_0 и $\widehat{H}_{вз}$ из H_0 и $H_{вз}$, мы покажем на следующем примере: $H_0 = \hbar\omega b^+b$.

Согласно (16.24) справедливо равенство

$$\widehat{H}_0 = \hbar\omega e^{\frac{i}{\hbar}Ht} b^+ b e^{-\frac{i}{\hbar}Ht},$$

которое обычным образом, вставив «1» между операторами b^+ и b , можно преобразовать к виду

$$\widehat{H}_0 = \hbar\omega e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \underbrace{b^+ e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{\widehat{b}^+} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \underbrace{b e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}}_{\widehat{b}},$$

т. е. к виду $\widehat{H}_0 = \hbar\omega \widehat{b}^+ \widehat{b}$.

Этот пример позволяет вывести следующее правило: переход от операторов $H_0, H_{вз}$ к операторам $\widehat{H}_0, \widehat{H}_{вз}$ осуществляется

с помощью следующих замен в операторах:

$$b \rightarrow \hat{b}, \quad b^+ \rightarrow \hat{b}^+, \quad a \rightarrow \hat{a}, \quad a^+ \rightarrow \hat{a}^+.$$

Часть выражения (16.29), которая относится к оператору H_0 :

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{b}_w^+] \quad (16.30)$$

можно легко вычислить, поскольку все операторы \hat{b}_w с различными w между собой коммутируют.

Таким образом, при образовании коммутатора (16.30) из всего оператора \hat{H}_0 нам нужно учесть только член суммы с w . Исходя из перестановочных бозе-соотношений $[\hat{b}_w, \hat{b}_{w'}^+] = \delta_{w, w'}$, для (16.30) сразу находим

$$i\omega_w \hat{b}_w^+. \quad (16.31)$$

Аналогичным образом можно поступить со второй частью выражения (16.29):

$$\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{вз}, \hat{b}_w^+]. \quad (16.32)$$

Поскольку операторы \hat{b}_w^+ между собой коммутируют, то с самого начала в выражении (15.21) для $\hat{H}_{вз}$ все члены с \hat{b}_w^+ можно опустить. Поскольку, кроме того, все операторы $\hat{b}_{w'}$ при $w \neq w'$ коммутируют с \hat{b}_w^+ , от суммы (15.21) остается один-единственный член с w . На основании перестановочных бозе-соотношений и предыдущего рассуждения (16.32) переходит в следующее выражение:

$$i \sum_k g_w \hat{a}_{k+w}^+ \hat{a}_w. \quad (16.33)$$

Если теперь собрать вместе (16.31) и (16.33), то вместо уравнения (16.29) мы получим в явном виде *уравнение движения для операторов \hat{b}_w^+ нашей задачи взаимодействия между электронами и колебаниями*:

$$\left| \hat{b}_w^+ = i\omega_w \hat{b}_w^+ + i \sum_k g_w \hat{a}_{k+w}^+ \hat{a}_k. \quad (16.34) \right.$$

Совершенно аналогичным образом получают уравнения для операторов \hat{b}_w :

$$\left| \hat{b}_w = -i\omega_w \hat{b}_w - i \sum_k g_w^* \hat{a}_k^+ \hat{a}_{k+w}. \quad (16.35) \right.$$

Эти уравнения чрезвычайно полезны потому, что они очень сильно напоминают классические уравнения движения: если бы

операторы \hat{a}^+ и \hat{a} были классическими величинами, то в рамках теории колебаний решетки, которые возбуждаются классическими силами (суммы по \mathbf{k} в (16.34) и (16.35)), мы нашли бы точно те же уравнения вида (16.34) и (16.35) для классических амплитуд \hat{b} и \hat{b}^+ (см. к этому задание 1). Эта тесная аналогия во многих случаях оказывается чрезвычайно полезной, поскольку она позволяет решать уравнения вида (16.34) и (16.35) совершенно аналогично уравнениям классической физики.

Задания к § 16

1. Рассмотрим особый случай $H_{\text{вз}} = 0$. Используя для H_0 выражение (16.13), показать:

а) если решение уравнения

$$H_0\Phi = i\hbar\dot{\Phi} \quad (\text{A } 16.1)$$

в шредингеровском представлении имеет вид

$$\Phi = e^{-i(\epsilon_1 + m_1\omega_1)t} a_1^+ \frac{1}{\sqrt{m_1!}} (b_1^+)^{m_1} \Phi_0, \quad (\text{A } 16.2)$$

причем Φ_0 является вакуумным состоянием, то решение

$$i\hbar\dot{\tilde{\Phi}} = 0 \quad (\text{A } 16.3)$$

имеет в представлении взаимодействия следующий вид:

$$\tilde{\Phi} = a_1^+ \frac{1}{\sqrt{m_1!}} (b_1^+)^{m_1} \Phi_0, \quad (\text{A } 16.4)$$

и, в совершенно общем случае,

б) если решение (A 16.1) имеет вид

$$\Phi = \sum c_{\{n_{\mathbf{k}}, m_{\mathbf{w}}\}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{\{n_{\mathbf{k}}, m_{\mathbf{w}}\}} t} \Phi_{\{n_{\mathbf{k}}, m_{\mathbf{w}}\}}, \quad (\text{A } 16.5)$$

то соответственно решением (A 16.3) является

$$\tilde{\Phi} = \sum c_{\{n_{\mathbf{k}}, m_{\mathbf{w}}\}} \Phi_{\{n_{\mathbf{k}}, m_{\mathbf{w}}\}}. \quad (\text{A } 16.6)$$

Указание. Применить преобразования (16.5), (16.4), правила (16.15) и (16.18), а также равенство

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \Phi_0 = \Phi_0. \quad (\text{A } 16.7)$$

Последнее равенство доказывается с помощью разложения экспоненциальной функции в ряд при учете того, что $H_0\Phi_0 = 0$.

2. а) Классическая функция Гамильтона гармонического осциллятора, находящегося под воздействием вынуждающей силы, имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 - f(t) q. \quad (\text{A } 16.8)$$

Переписать уравнения Гамильтона для \dot{p} и \dot{q} в новых переменных

$$\begin{aligned} \beta(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\frac{i}{\sqrt{m\omega}} p + \sqrt{m\omega} q \right), \\ \beta^*(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(-\frac{i}{\sqrt{m\omega}} p + \sqrt{m\omega} q \right) \end{aligned} \quad (\text{A } 16.9)$$

и сравнить результат с (A 16.11) и (A 16.12).

б) Показать, что оператору Гамильтона

$$H = \hbar\omega b^+ b + \hbar F^*(t) b + \hbar F(t) b^+ \quad (\text{A } 16.10)$$

отвечают следующие уравнения движения:

$$\dot{\hat{b}}^+ = i\omega \hat{b}^+ + iF^*(t), \quad (\text{A } 16.11)$$

$$\dot{\hat{b}} = -i\omega \hat{b} - iF(t). \quad (\text{A } 16.12)$$

При этом $F(t)$ является классической «силой».

Решить (A 16.11) и (A 16.12) со следующими начальными условиями (почему?):

$$\hat{b}(0) = b, \quad \hat{b}^+(0) = b^+, \quad (\text{A } 16.13)$$

причем операторы b^+ и b заданы в шредингеровском представлении. Убедиться с помощью решения, что $\hat{b}(t)$, $\hat{b}^+(t)$ для всех моментов времени удовлетворяют соотношению $[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1$. Вычислить $\langle \Phi_0 | \hat{b} | \Phi_0 \rangle$ при $b\Phi_0 = 0$ и сравнить результат с результатом задания 4 в § 6, причем положить $F = -\omega\gamma$ (γ — действительная величина).

3. Ввести уравнение для фермиевского оператора уничтожения $\psi(x, t)$ в представлении Гейзенберга, используя (см. (13.30))

заданный ниже гамильтониан

$$H = \int \psi^+(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) d^3x + \\ + \frac{1}{2} \int \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) d^3x d^3x'. \quad (\text{A } 16.14)$$

Решение:

$$i\hbar \frac{d\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)}{dt} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) + \\ + \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}', t) \frac{e^2}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|} \hat{\psi}(\mathbf{x}', t) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) d^3x'. \quad (\text{A } 16.15)$$

4. С помощью оператора Гамильтона (15.25) вывести уравнения движения для произведения операторов $a_{\mathbf{k}_1}^+, a_{\mathbf{k}_2}$.

Глава IV. ЭЛЕКТРОНЫ В «ЗАМОРОЖЕННОЙ» РЕШЕТКЕ

§ 17. Электроны в кристаллической решетке: краткое изложение теории Блоха

Мы рассматриваем кристаллическую решетку, атомы которой расположены в пространстве строго периодически и покоятся. Тем самым мы временно не учитываем колебаний решетки. Каждый электрон в кристаллической решетке движется в электрическом поле атомных ядер и всех остальных электронов. Таким образом, речь идет о чрезвычайно сложной проблеме многих частиц.

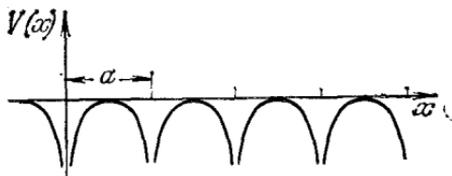


Рис. 25. Общий вид изменения потенциала решетки.

В блоховской теории электронов в кристаллической решетке проблема многих электронов сводится к одноэлектронной проблеме следующим образом. Представим себе, что действие атомных ядер и всех остальных электронов на выделенный электрон можно описать в целом, задав наперед поле потенциала $V(x)$. Поскольку элементарные ячейки решетки расположены строго периодически, то этот потенциал тоже должен обладать периодичностью решетки (рис. 25). Это свойство мы отобразим формулой

$$V(x + 1) = V(x), \quad (17.1)$$

где 1 — один из векторов решетки, т. е. вектор, проведенный из одной точки решетки к следующей. Одночастичное уравнение Шредингера, как известно из обычной квантовой механики, имеет вид

$$H\varphi \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \right) \varphi(x) = E\varphi(x). \quad (17.2)$$

Теперь мы извлечем пользу из периодичности потенциала V . Для этого определим «оператор трансляции» T следующим свойством: если оператор T действует на некоторую функцию $F(x)$, то координата x в F заменяется на $x + 1$:

$$TF(x) = F(x + 1).$$

Выберем в качестве функции $F(\mathbf{x}) = H(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x})$ и примем во внимание, что в силу (17.1) справедливо равенство

$$TH(\mathbf{x}) = H(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = H(\mathbf{x}).$$

Тогда получим $TH(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}) = H(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = H(\mathbf{x})T\varphi(\mathbf{x})$, или, после небольшого преобразования, $(TH(\mathbf{x}) - H(\mathbf{x})T)\varphi(\mathbf{x}) = 0$. Поскольку это равенство справедливо для любой функции $\varphi(\mathbf{x})$, то отсюда следует, что в квантовой теории

$$TH - HT = 0. \quad (17.3)$$

Поскольку T и H коммутируют, волновую функцию $\varphi(\mathbf{x})$ согласно основным правилам квантовой механики можно выбрать так, что она будет не только собственной функцией оператора H согласно уравнению (17.2), но и собственной функцией оператора трансляции T :

$$T\varphi(\mathbf{x}) = \lambda\varphi(\mathbf{x}). \quad (17.4)$$

Тогда n -кратное применение оператора трансляции к функции $\varphi(\mathbf{x})$ приводит к n -кратному умножению $\varphi(\mathbf{x})$ на λ :

$$T^n\varphi = \lambda^n\varphi. \quad (17.5)$$

Поскольку $T^n\varphi(\mathbf{x})$ есть не что иное, как $\varphi(\mathbf{x} + n\mathbf{l})$, которая согласно условию нормировки должна быть ограничена, то отсюда следует, что и $\lambda^n\varphi(\mathbf{x})$ также должна быть ограничена. Поскольку $\varphi(\mathbf{x})$ не может быть тождественно равна нулю, то λ по величине определенно не может быть больше единицы. С другой стороны, λ по величине не может быть и меньше единицы, так как в противном случае при движении в отрицательном направлении (заменяется на -1) вновь приходим к утверждению, что φ неограничена. Поэтому должно иметь место равенство

$$|\lambda| = 1. \quad (17.6)$$

Для того чтобы удовлетворить условию (17.6), представим λ в виде¹⁾

$$\lambda = e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (17.7)$$

С помощью (17.7) соотношение (17.4) можно сформулировать следующим образом:

$$\varphi(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}\varphi(\mathbf{x}). \quad (17.8)$$

Для того чтобы удовлетворить функциональному соотношению (17.8), представим φ в виде

$$\varphi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (17.9)$$

¹⁾ В согласии с большинством оригинальных работ мы обозначаем волновой вектор электронной волны через \mathbf{k} .

Подстановка (17.9) в (17.8) приводит к утверждению, что функция u периодична с периодом решетки:

$$| u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (17.10)$$

Соотношения (17.9) и (17.10) представляют собой теорему Блоха: собственные функции в бесконечно протяженной решетке имеют вид плоских волн, модулированных с периодом решетки (рис. 26). Проблема теперь, собственно, состоит в том, чтобы определить функции $u(\mathbf{x})$ при заданном потенциале V . Если подставить (17.9) в уравнение Шредингера (17.2), то после элементарного вычисления получается следующее уравнение для u :

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}^2 - 2i\mathbf{k} \text{grad} - \Delta) + V(\mathbf{x}) \right\} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{k},j} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (17.11)$$

Из этого уравнения вытекает, что u , а следовательно, и энергия E зависят и от волнового вектора \mathbf{k} как от параметра. При фиксированном \mathbf{k} уравнение (17.11)

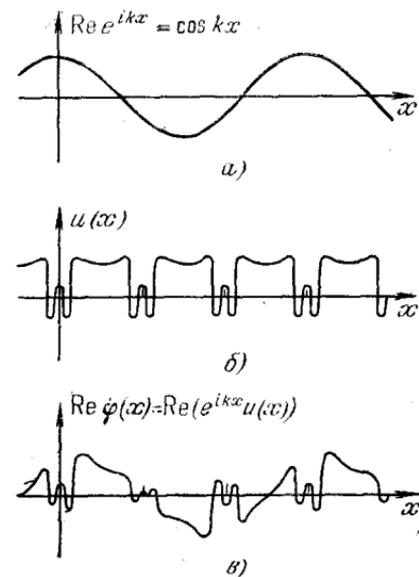


Рис. 26. Блоховская волна представляет собой плоскую волну (а), которая модулирована с периодом решетки функцией u (б); кривая (в) представляет действительную часть результирующей блоховской волны.

допускает ряд собственных значений, которые поэтому следует обозначить еще одним индексом j . Следует ожидать поэтому, что E , с одной стороны, непрерывным образом зависит от \mathbf{k} , а с другой стороны, зависит от дискретных индексов j . Для определения u и E следует прибегнуть либо к точно решаемым простым моделям, либо к приближенным методам, таким, например, как теория возмущений или численные методы решения. Определенные зависимости энергии $E_{\mathbf{k},j}$ от \mathbf{k} и j является важной задачей, которую, однако, нам нет необходимости здесь обсуждать, поскольку она ничего не дает для понимания квантовой теории поля. Поэтому мы сразу приведем важнейший результат, наглядно представленный на рис. 27. Энергии как функции k расположены полосами, т. е. так называемые разрешенные зоны перемежаются запрещенными зонами. В конечном кристалле в распоряжении электронов внутри этих зон имеются тесно расположенные дискретные состояния ($k = 2\pi n/L$). Эти состояния, соглас-

но принципу Паули, могут заполняться снизу электронами с двумя противоположно направленными спинами. Последнюю заполненную полосу обычно называют валентной зоной, а первую пустую или частично заполненную зону — зоной проводимости.

Поведение электронов в кристалле, в особенности на краю зон, в нашем случае при $k=0$, легко понять. Например, как ясно из рис. 27, энергию E на краю зоны можно разложить по k и для достаточно малых значений k представить в виде

$$E_{k,j} = E_{0,j} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (17.12)$$

(В (17.12) мы ограничились простейшим случаем изотропной зоны. В этом случае разложение начинается с члена, пропорционального квадрату величины k^2 .)

Зависимость (17.12) находится в полном согласии со случаем свободных электронов, с той лишь разницей, что теперь масса m^* совершенно отлична от массы свободного электрона. Этот множитель m^* , называемый также *эффективной* или *кажущейся массой*, может быть не только существенно больше, но и существенно меньше, нежели в случае свободного электрона.

Эта аналогия между электроном в кристалле и свободным электроном, однако, простирается существенно дальше. Рассмотрим для этого волновой пакет, образованный из волн вида (17.9) в окрестности некоторого значения волнового числа k . Тогда легко показать, что групповая скорость v этого волнового пакета может быть представлена обычным образом в следующем виде:

$$v = \frac{\partial \omega}{\partial k}. \quad (17.13)$$

Если теперь применить соотношение $E = \hbar \omega$, то (17.13) можно представить в виде

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}, \quad (17.14)$$

или, в трехмерном случае, в виде

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} E. \quad (17.14a)$$

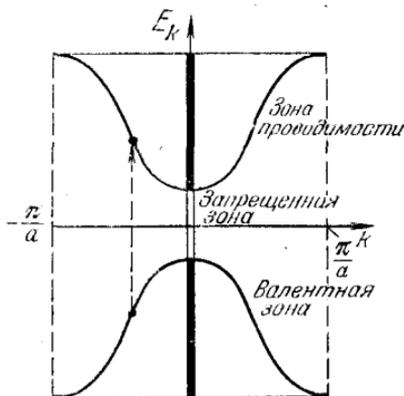


Рис. 27. Энергия валентной зоны и зоны проводимости как функция k . Вертикальные черные участки на оси E_k представляют собой проекции запрещенных значений энергии. При этом возникают зоны, разделенные запрещенными областями. При поглощении и испускании электроны совершают вертикальный переход между зонами (штриховая стрелка).

Если воспользоваться для E выражением (17.12), то получим применяемое в случае свободных электронов соотношение между импульсом $\hbar \mathbf{k}$ и скоростью \mathbf{v} :

$$\left| \mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*}. \right. \quad (17.15)$$

Таким образом, в присутствии внешних полей электрон ведет себя совершенно как свободная частица с эффективной массой m^* , если только эти поля достаточно медленно изменяются в пространстве и времени (см. § 18). Так, например, в присутствии электрического поля \mathbf{F} справедливо следующее уравнение движения:

$$\left| m^* \dot{\mathbf{v}} \equiv \hbar \dot{\mathbf{k}} = e\mathbf{F}. \right. \quad (17.16)$$

Из сказанного следует, что зонная модель позволяет ввести формулы для электрической проводимости, причем электроны можно считать свободными частицами. Далее, эта модель показывает, что электрическая проводимость возникает при наличии отдельных (или многих) электронов в зоне проводимости, а для до конца заполненной зоны она равна нулю, что приводит к естественному различию между изоляторами и проводниками. Далее, зонная модель позволяет сделать предсказания относительно оптического поглощения. Оказывается, что при оптическом переходе имеет место так называемое правило отбора по волновому вектору \mathbf{k} , которое гласит, что электроны при оптическом возбуждении переходят из валентной зоны в зону проводимости с сохранением их волновых векторов \mathbf{k} (см. рис. 27). На основе этих представлений получается следующий ход кривой поглощения. При малых энергиях фотонов электроны не могут перейти из валентной зоны в зону проводимости. Если энергия возрастает до величины, равной ширине запрещенной зоны, то переход становится возможным и тогда можно ожидать появления полосы поглощения вида, представленного на рис. 28.

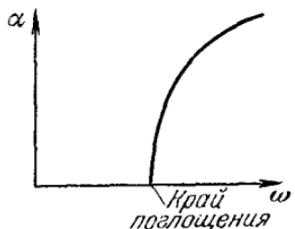


Рис. 28. Коэффициент поглощения α как функция частоты света при межзонном переходе (схематически).

Несмотря на многочисленные успехи, зонная модель имеет, однако, существенные недостатки, из которых мы упомянем следующие:

1. Мы исходим из решеточного потенциала $V(\mathbf{x})$, который периодичен с периодом решетки, однако этот потенциал должен быть определен, собственно говоря, через взаимодействие электронов между собой.

2. Мы не учитываем спин-орбитального взаимодействия, которое может существенно изменить картину зонной структуры. В частности, оно может привести к появлению запрещенных зон в местах, где их не было бы без учета спин-орбитального взаимодействия.

2. Если из валентной зоны удаляется электрон, то в ней остается незанятое состояние (дырка), которая ведет себя, как известно из эксперимента, как самостоятельная частица с положительным зарядом и определенной эффективной массой. Следовательно, нужно доказать, что система из N электронов в валентной зоне ведет себя в точности как отдельная частица, что можно сделать удовлетворительным образом только в рамках метода вторичного квантования. Уже эти примеры показывают, что рассмотрение проблемы многих электронов (в особенности в рамках метода вторичного квантования) представляет собой первоочередную задачу теории твердого тела. На этих проблемах мы остановимся в §§ 20, 21 и 22.

3. Кривая поглощения, представленная на рис. 28, обнаружена не во всех объектах. Часто на подобную полосу поглощения накладываются более или менее широкие дискретные линии, которые происходят не от дефектов структуры, а являются свойством системы электронов матрицы решетки. Поскольку эти линии не могут быть предсказаны в рамках зонной модели, следует включить в рассмотрение принципиально новые соображения в рамках теории многих частиц (§§ 23, 24).

§ 18. Метод эффективной массы

В этом параграфе будет доказано основополагающее для физики твердого тела

Предложение. Электроны, находящиеся в периодическом поле кристалла вблизи нижнего края зоны проводимости, под воздействием дополнительного *медленно меняющегося* поля ведут себя как электроны в свободном пространстве, но с *эффективной массой* m^* .

Это предложение утверждает, таким образом, что решеточный потенциал можно полностью исключить, если заменить массу электрона m на эффективную массу m^* .

Для доказательства этого предложения придадим ему прежде всего строгий математический вид. Для этого введем следующие обозначения и предпосылки:

Пусть $V(\mathbf{x})$ — периодический с периодом решетки потенциал.

Пусть $W(\mathbf{x})$ — потенциал дополнительного поля. Это поле должно меняться в кристалле столь медленно, что внутри одной элементарной ячейки оно может считаться постоянным.

Решение уравнения Шредингера для $V(\mathbf{x})$ (т. е. без $W(\mathbf{x})$):

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (18.1)$$

согласно теореме Блоха (17.9), (17.10) имеет вид

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{N}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (18.2)$$

В этом решении в явном виде из $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ выделен нормировочный множитель $1/\sqrt{N}$ (N — число элементарных ячеек в кристалле), так что $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ нормирована в элементарной ячейке.

Пусть $E_{\mathbf{k}}$ в точке $\mathbf{k} = 0$ можно представить в виде

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + (\text{члены более высокого порядка, которыми можно пренебречь}). \quad (18.3)$$

Точная математическая формулировка гласит:

Собственные значения энергии и волновые функции проблемы в целом с учетом решеточного потенциала $V(\mathbf{x})$ и дополнительного потенциала $W(\mathbf{x})$:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) + W(\mathbf{x}) \right\} \varphi(\mathbf{x}) = E\varphi(\mathbf{x}) \quad (18.4)$$

могут быть определены с помощью собственных значений энергии и волновых функций значительно более простой проблемы:

$$\left\{ E_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + W(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) = E'\psi(\mathbf{x}) \quad (18.5)$$

в следующем смысле:

1. Собственные значения энергий совпадают:

$$E = E'.$$

2. Если разложить $\varphi(\mathbf{x})$ по блоховским волнам (18.2), а $\psi(\mathbf{x})$ по плоским волнам, то коэффициенты разложения $c_{\mathbf{k}}$ функций $\varphi(\mathbf{x})$ и $\psi(\mathbf{x})$ тождественны:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (18.6)$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \quad (18.7)$$

\Updownarrow тождественны!

В (18.7) V обозначает объем кристалла.

Если в (18.7) и тем самым также в (18.6) существенны лишь коэффициенты с малым \mathbf{k} , то в $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ можно положить $\mathbf{k} \approx 0$. Тогда в (18.6) и (18.7) получим следующее приближенное равенство:

$$\varphi(\mathbf{x}) \approx u_0(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}).$$

Следовательно, решение (18.4), которое мы ищем, имеет вид произведения быстро меняющегося решеточного множителя $u_0(\mathbf{x})$ и медленно меняющегося «модулирующего» множителя $\psi(\mathbf{x})$.

Перейдем к доказательству утверждений 1 и 2¹⁾:

а) подставим разложение (18.6) в (18.4) и получим уравнение для коэффициентов c_k ;

б) исходя из наших предположений относительно $W(x)$ и E_k , упростим это уравнение;

в) покажем, что это новое уравнение тождественно (18.5), если применить разложение (18.7).

а) Подставляем (18.6) в (18.4), умножаем слева на φ_k^* и интегрируем по объему:

$$\begin{aligned} \sum_k c_k \int \varphi_k^*(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) + W(x) \right\} \varphi_k(x) d^3x = \\ = \sum_k c_k E \int \varphi_k^*(x) \varphi_k(x) d^3x. \end{aligned} \quad (18.8)$$

Учтем в левой части этого уравнения, что $\varphi_k(x)$ удовлетворяет уравнению (18.1), и введем следующее сокращенное обозначение:

$$W_{k'k} = \frac{1}{N} \int e^{-ik'x} u_{k'}^*(x) W(x) e^{ikx} u_k(x) d^3x. \quad (18.9)$$

Воспользуемся, наконец, в обеих частях (18.8) ортогональностью блоховских волн. Тогда получаем

$$c_k E_{k'} + \sum_k c_k W_{k'k} = E c_{k'}. \quad (18.10)$$

б) Упростим уравнение (18.10). Для $E_{k'}$ используем (18.3). Интеграл $W_{k'k}$ (18.9) разложим в сумму по отдельным элементарным ячейкам с радиусом-вектором l :

$$W_{k'k} = \frac{1}{N} \sum_l \int_{\text{элементарная ячейка } l} e^{-ik'x} u_{k'}^*(x) W(x) e^{ikx} u_k(x) d^3x. \quad (18.11)$$

Согласно предположению следует считать $W(x)$ внутри элементарной ячейки постоянной, так что $W(x) = W(l)$ можно вынести за знак интеграла.

Примем теперь, что основную роль в (18.6) и (18.7) и тем самым также в (18.11) играют только малые значения k . (Согласно соотношению неопределенности $\Delta k \Delta x \approx 1$ это означает, что волновой пакет (18.7) имеет большую протяженность Δx .) Отсюда следует:

¹⁾ Читатель, более интересующийся полевыми методами, это доказательство может пропустить.

ба) член $e^{-ik'x}e^{ikx}$ мало меняется внутри элементарной ячейки, поэтому может быть вынесен за знак интеграла;

бб) в $u_{k'}^*(\mathbf{x})$ и $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ можно положить $\mathbf{k}' = \mathbf{k} = 0$ (иными словами, u^* и u разлагаются по \mathbf{k}' и \mathbf{k} , причем членами высшего порядка малости можно пренебречь). Тогда получаем

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \approx i \overline{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} W(\mathbf{l}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{l}} \int_{\text{элементарная ячейка } \mathbf{l}} u_0^*(\mathbf{x}) u_0(\mathbf{x}) d^3x. \quad (18.12)$$

Поскольку функции u периодичны с периодом решетки и нормированы на 1 внутри элементарной ячейки, выражение (18.12) переходит в

$$\overline{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} W(\mathbf{l}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{l}}. \quad (18.13)$$

Теперь сделаем один шаг назад: поскольку $W(\mathbf{x})$ и экспоненциальные функции меняются медленно, сумму по \mathbf{l} можно преобразовать в интеграл по кристаллу (причем справедливо соотношение $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l}} \rightarrow \frac{1}{V} \int \dots d^3x$), тогда получим

$$\overline{W}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \int \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-ik'\mathbf{x}} W(\mathbf{x}') \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik\mathbf{x}'} d^3x', \quad (18.14)$$

причем множители в этом выражении расположены несколько по-иному. Теперь подставим (18.3) и (18.14) в (18.10), поменяв порядок следования \int и \sum :

$$\left(E_0 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m^*}\right) c_{\mathbf{k}'} + \int \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-ik'\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}') \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik\mathbf{x}'} d^3x' = E c_{\mathbf{k}'}. \quad (18.15)$$

Умножим это уравнение на $1/\sqrt{V} e^{ik'\mathbf{x}}$, учитывая, что $\mathbf{k}'^2 e^{ik'\mathbf{x}} = -\Delta e^{ik'\mathbf{x}}$, и просуммируем по \mathbf{k}' :

$$\begin{aligned} & \left(E_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta\right) \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik'\mathbf{x}} + \\ & + \int \left\{ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} e^{ik'(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\right\} W(\mathbf{x}') \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik\mathbf{x}'} d^3x' = E \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik'\mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (18.16)$$

Если теперь положить $\sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}} = \varphi(\mathbf{x})$ и учесть, что

$$\left\{ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \right\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \text{ то получим прямо уравнение (18.5).}$$

Тем самым наше предложение доказано.

§ 19. Функции Ваннье: волновые пакеты из функций Блоха

Волновые пакеты, в частности из плоских волн, хорошо известны в квантовой теории. С их помощью можно локализовать волновые функции частиц в определенном объеме пространства, отобразив тем самым локализацию частиц. Ввиду близкой аналогии между блоховскими и плоскими волнами можно попытаться построить волновые пакеты такого рода из блоховских волн. Это делается следующим образом:

$$w(\mathbf{x} - \mathbf{l}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (19.1)$$

причем сумма распространяется на все значения \mathbf{k} внутри данной энергетической зоны. N — число элементарных ячеек. Функции, определяемые с помощью ряда (19.1), называются *функциями Ваннье*. Они обладают целым рядом важных для теории твердого тела свойств, которые мы рассмотрим ниже.

1. *Функции Ваннье описывают локализацию электрона* в окрестности точки \mathbf{l} на протяжении примерно одной постоянной решетки. Чтобы увидеть это, рассмотрим особый случай, когда функции $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ не зависят от \mathbf{k} :

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \Rightarrow u_0(\mathbf{x}). \quad (19.2)$$

В этом случае суммирование в (19.1) выполняется сразу и для кристалла, который имеет форму куба, дает (с точностью до некоторого фазового множителя)

$$w(\mathbf{x} - \mathbf{l}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_0(\mathbf{x}) \frac{\sin \left\{ (x - l_x) \frac{\pi}{a} \right\} \sin \left\{ (y - l_y) \frac{\pi}{a} \right\} \sin \left\{ (z - l_z) \frac{\pi}{a} \right\}}{\sin \left\{ (x - l_x) \frac{\pi}{L} \right\} \sin \left\{ (y - l_y) \frac{\pi}{L} \right\} \sin \left\{ (z - l_z) \frac{\pi}{L} \right\}}. \quad (19.3)$$

Здесь a — постоянная решетки, а L — линейный размер кристалла. Как легко убедиться, синусы в знаменателе можно заменить

их аргументами, так что (19.3) переходит в выражение

$$w(\mathbf{x} - \mathbf{l}) = u_0(\mathbf{x}) \sqrt{N} \left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \frac{\sin\left\{(x - l_x) \frac{\pi}{a}\right\}}{(x - l_x)} \frac{\sin\left\{(y - l_y) \frac{\pi}{a}\right\}}{(y - l_y)} \frac{\sin\left\{(z - l_z) \frac{\pi}{a}\right\}}{(z - l_z)}. \quad (19.4)$$

Как легко видеть из поведения функций (19.4), волновые функции w действительно локализованы в области пространства с линейным размером a .

Прежде чем мы двинемся дальше, обсудим еще некоторое обобщение (19.1). Нам придется часто иметь дело с функциями Ваннье, которые принадлежат различным зонам. В этом случае следует различать модулирующие функции $u_{\mathbf{k}}$ с помощью еще одного индекса μ . Тогда и функция Ваннье зависит от этого индекса μ .

2. *Функции Ваннье, локализованные в различных точках \mathbf{l} , \mathbf{l}' или принадлежащие различным зонам μ , μ' , взаимно ортогональны.* Для доказательства этого положения образуем следующее выражение:

$$\int w_{\mu}^*(\mathbf{x} - \mathbf{l}) w_{\mu'}(\mathbf{x} - \mathbf{l}') d^3x = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l} - i\mathbf{k}'\mathbf{l}'} \underbrace{\int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{\mathbf{k},\mu}^*(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}} u_{\mathbf{k}',\mu'}(\mathbf{x}) d^3x}_{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mu\mu'}}. \quad (19.5)$$

Поскольку блоховские функции различных зон или различных значений \mathbf{k} взаимно ортогональны, интеграл преобразуется в произведение символов Кронекера. Тогда (19.5) переходит в выражение

$$\delta_{\mu\mu'} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l} - i\mathbf{k}\mathbf{l}'}. \quad (19.6)$$

Суммирование по \mathbf{k} выполняется сразу же (см., например, § 7) и вновь дает символ Кронекера для различных точек локализации. Тогда получаем окончательно следующее соотношение:

$$\int w_{\mu}^*(\mathbf{x} - \mathbf{l}) w_{\mu'}(\mathbf{x} - \mathbf{l}') d^3x = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\mathbf{l}\mathbf{l}'}. \quad (19.7)$$

§ 20. Электроны в кристаллической решетке: формулировка проблемы многих тел. Приближение Хартри — Фока

В этом параграфе мы сформулируем проблему многих электронов в твердом теле с помощью вторичного квантования. Для этого положим в основу следующую модель: электроны должны

двигаться в строго периодической решетке, ионы которой считаются бесконечно тяжелыми и поэтому покоятся. Далее примем, что электроны *внутренних* атомных оболочек учитываются в целом тем, что они вместе с положительными атомными ядрами создают эффективный, периодический с периодом решетки потенциал V_p . Поскольку энергия кулоновского взаимодействия между электронами дает наибольший из всех взаимодействий между электронами вклад, то в дальнейшем мы учтем явно только эту энергию. Однако общий формализм можно распространить и на другие взаимодействия, например магнитное взаимодействие. Оператор Гамильтона состоит из трех частей: кинетической энергии электронов, потенциальной энергии в периодической кристаллической решетке и, наконец, кулоновского взаимодействия между электронами. Как мы уже видели в § 13, соответствующее уравнение Шредингера имеет вид

$$\left| \int \psi^+(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) d^3x + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \iint \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) d^3x d^3x' \right] \Phi = E\Phi. \quad (20.1)$$

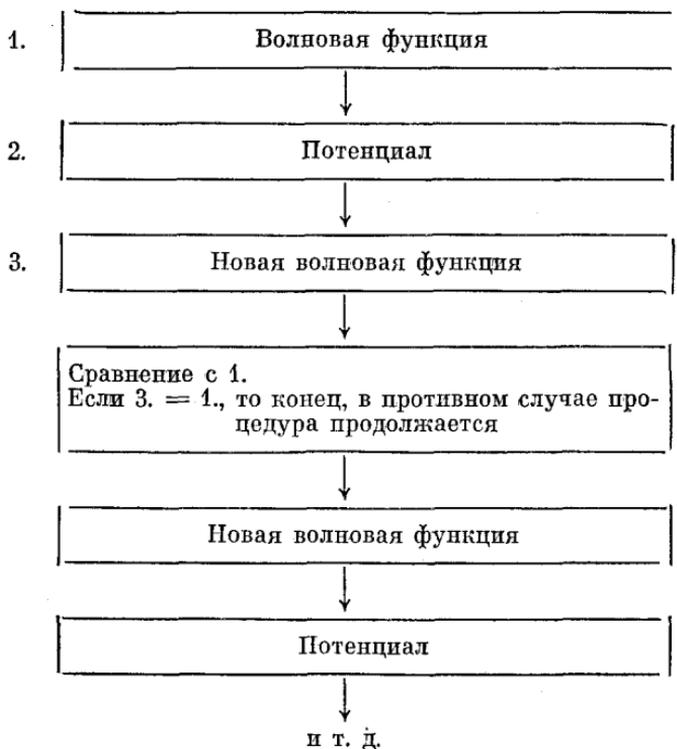
При этом функции $\psi^+(\mathbf{x})$ и $\psi(\mathbf{x})$ являются еще операторами, которые удовлетворяют ферми-перестановочным соотношениям из § 13. Разложим эти операторы по собственным функциям $\varphi_k(\mathbf{x})$ и $\varphi_k^*(\mathbf{x})$:

$$\left| \psi(\mathbf{x}) = \sum_k a_k \varphi_k(\mathbf{x}), \quad (20.2) \right.$$

$$\left| \psi^+(\mathbf{x}) = \sum_k a_k^+ \varphi_k^*(\mathbf{x}). \quad (20.3) \right.$$

Примем вначале, что эти собственные функции φ_k и φ_k^* образуют полный набор ортонормированных функций. Однако мы не предполагаем, что эти волновые функции являются решением уравнения Шредингера, а наоборот, мы хотим найти уравнение Шредингера, для которого эти φ_k являются «оптимальными» собственными функциями. Под этим понимается следующее. Мы намереваемся установить эти волновые функции в рамках метода Хартри — Фока. Эта процедура проводится следующим образом. Считается, что волновые функции нулевого приближения заданы, затем определяют поле потенциала, вызванного распределением зарядов для этих волновых функций; отсюда вновь находят волновые функции, соответствующие полю атомных остовов и упомянутого выше распределения зарядов, затем эти новые волновые функции используются в качестве исходного

пункта для следующего приближения (см. таблицу). Мы не будем, однако, повторять этот метод обычным образом, а дадим его обоснование прямо в рамках вторичного квантования. Для этого, как уже говорилось, будем считать, что имеются волновые функции Φ_k , заданные в указанном ниже смысле, и создадим теперь



некоторое состояние Φ электронов кристалла. Для этого будем размещать электроны один за другим по состояниям k_1, k_2, \dots, k_N . То есть в основу рассмотрения кладется функция состояния

$$\Phi = a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_N}^+ \Phi_0. \quad (20.4)$$

Используя эту функцию состояния (20.4), образуем среднее значение оператора Гамильтона (20.1) с дополнительным условием, что эта функция состояния нормирована. Нормировка Φ включает, очевидно, нормировку введенных выше функций ϕ , так что это дополнительное условие в последующем изложении будет считаться выполненным.

Функция (20.4), конечно, не является точной, поскольку она не учитывает корреляции между электронами. Если же мы хотим получить оптимальную, т. е. в вариационном смысле минимальную, энергию, нам потребуются еще произвольные параметры.

Поскольку амплитуды a_k и a_k^\dagger являются строго заданными операторами с перестановочными соотношениями (13.4), (13.5), (13.6), то единственными величинами, которые можно варьировать, являются волновые функции φ_k . Поэтому наша цель состоит в следующем. Потребуем выполнения условия

$$| \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \text{Минимум} | \quad (20.5)$$

с дополнительным условием

$$| \langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \quad (20.6)$$

и вычислим выражение в левой части уравнения (20.5) как функцию или, точнее говоря, как «функционал» φ_k . Затем определим φ_k с помощью варьирования. Для того чтобы выполнить эту программу, подставим (20.2) и (20.3) в уравнение Шредингера (20.1). Поскольку операторы a^\dagger и a не зависят от интегрирования, а волновые функции φ коммутируют с операторами, операторы можно вынести за знак интеграла, после чего получаем следующее выражение для оператора Гамильтона H :

$$\left| \begin{aligned} H = & \sum_{lm} a_l^\dagger a_m \int \varphi_l^*(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right\} \varphi_m(\mathbf{x}) d^3x + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{lm'l'm'} a_l^\dagger a_m^\dagger a_m a_{l'} \int \varphi_l^*(\mathbf{x}) \varphi_m^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \times \\ & \times \varphi_{m'}(\mathbf{x}') \varphi_{l'}(\mathbf{x}) d^3x d^3x'. \end{aligned} \right. \quad (20.7)$$

Теперь следует построить среднее значение этого гамильтониана на функциях состояния (20.4). Для этого следует более обстоятельно обсудить различные средние значения для отдельных операторов a^\dagger , a . Начнем с выражения

$$\langle a_{k_1}^\dagger \dots a_{k_N}^\dagger \Phi_0 | a_l^\dagger a_m | a_{k_1}^\dagger \dots a_{k_N}^\dagger \Phi_0 \rangle. \quad (20.8)$$

Для того чтобы провести вычисление этого выражения, рассмотрим в качестве вспомогательного средства рис. 29. Точки на оси k обозначают здесь отдельные квантовые состояния, в которые могут быть помещены электроны. Действительно, занятые состояния k_1 , k_2 , k_3 и т. д. обозначены вертикальными отрезками. Согласно соотношению (20.8), под действием оператора уничтожения a_m один электрон в состоянии m должен быть уничтожен. Если в этом состоянии электронов нет, то оператором уничтожения можно подействовать непосредственно на основное состояние Φ_0 , в результате чего получим нуль. Отличный от нуля вклад получится только тогда, когда m равно одному из k . В примере, приведенном на рис. 29, $m = k_3$. Для того чтобы уничтожить электрон в состоянии k_j , следует переставить a_m со всеми операторами рождения, стоящими слева от оператора с индексом k_j .

Учитывая антиперестановочные соотношения (13.4—13.6), получим множитель (-1) в степени числа перестановок. Далее следует учесть, что $a_m a_{k_j}^+ = \delta_{m, k_j} - a_{k_j}^+ a_m$. Поскольку теперь в состоянии m больше электрона нет, действие оператора уничтожения на стоящее в (20.8) электронное состояние дает нуль. Поэтому в конце концов остается вычислить лишь выражение следующего вида:

$$\langle a_{k_1}^+ \dots a_{k_N}^+ \Phi_0 | a_i^+ a_{k_1}^+ \dots a_{k_{j-1}}^+ a_{k_{j+1}}^+ \dots a_{k_N}^+ \Phi_0 \rangle \cdot (-1)^{\text{перестановки}} \quad (20.9)$$

Теперь перенесем оставшийся оператор рождения a_i^+ на освободившееся место с индексом k_j ; при этом придется провести ровно

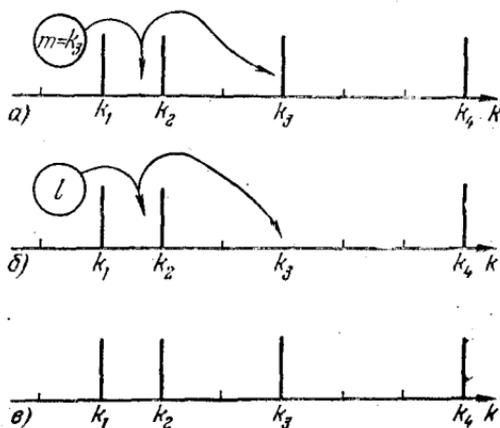


Рис. 29. К вычислению среднего значения (20.8).

столько же перестановок, сколько и прежде, в результате чего знак минус в (20.9) выпадает. Согласно (13.37), функции состояния с различными электронными заселенностями взаимно ортогональны. Теперь в (20.9) слева стоит функция состояния, в которой состояния k_1, k_2, \dots, k_N заняты, а справа стоит функция, в которой равным образом заняты все состояния, вплоть до k_j . Состояние $k_j = m$, напротив, переставлено с состоянием l . Согласно условию ортогональности, выражение (20.9)

отлично от нуля только тогда, когда $k_j = l$. Поэтому получаем следующий результат для среднего значения (20.8):

$$\left| \begin{aligned} \langle a_{k_1}^+ \dots a_{k_N}^+ \Phi_0 | a_i^+ a_m | a_{k_1}^+ \dots a_{k_N}^+ \Phi_0 \rangle = \\ = \begin{cases} \delta_{ml}, & \text{если } m = k_1, \dots, k_N, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \end{aligned} \right. \quad (20.10)$$

Тем самым мы вычислили те средние значения, которые служат мерой одночастичных операторов в (20.7).

Теперь рассмотрим средние значения для энергии взаимодействия, которая задается выражением

$$\langle \Phi | a_i^+ a_m^+ a_l \cdot a_l | \Phi \rangle. \quad (20.11)$$

Для наглядности вычисления (20.11) снова приведем картинку (рис. 30).

Вертикальные отрезки на оси k вновь обозначают занятые состояния. Рассмотрим вначале действие оператора уничтожения $a_{l'}$. Отличный от нуля результат действия этого оператора получается только тогда, когда состояние $k_j = l'$ занято. Тогда функция состояния Φ переходит в

$$a_{k_1}^+ \dots a_{k_{j-1}}^+ a_{k_{j+1}}^+ \dots a_{k_N}^+ \Phi_0 \cdot (-1)^{\text{число перест. } (l' - k_j)}, \quad (20.12)$$

причем всякий раз вновь, когда необходимы перестановки, чтобы перенести оператор уничтожения $a_{l'}$ слева через операторы рождения $a_{k_i}^+$ до места k_j , появляется множитель (-1) .

Пусть теперь оператор уничтожения $a_{m'}$ действует соответствующим образом на состояние (20.12). Вновь не равный нулю вклад получится только в том случае, если m' совпадает с одним из оставшихся состояний k_1, k_2, \dots, k_N (исключая состояние k_j) и вновь появится множитель (-1) в степени числа перестановок. Из состояния (20.4), занятого N электронами, возникает занятое $N - 2$ электронами состояние

$$\begin{aligned} & a_{k_1}^+ \dots a_{k_{j-1}}^+ a_{k_{j+1}}^+ \dots \times \\ & \times \dots a_{k_{i-1}}^+ a_{k_{i+1}}^+ \dots a_{k_N}^+ \Phi_0 \times \\ & \times (-1)^{\text{число перест. } (l' \rightarrow k_j, m' \rightarrow k_i)}. \end{aligned} \quad (20.13)$$

В результате последующего действия обоих стоящих в (20.11) операторов рождения a_i^+ и a_m^+ из состояния (20.13)

вновь образуется состояние с N электронами, которое либо совпадает с первоначальным состоянием (20.4), либо может отличаться от него. Если это состояние отличается от первоначального, то выражение (20.11) обращается в нуль, так как новое состояние (20.13) ортогонально старому состоянию (20.4), которое также стоит слева в выражении (20.11). Поэтому необхо-

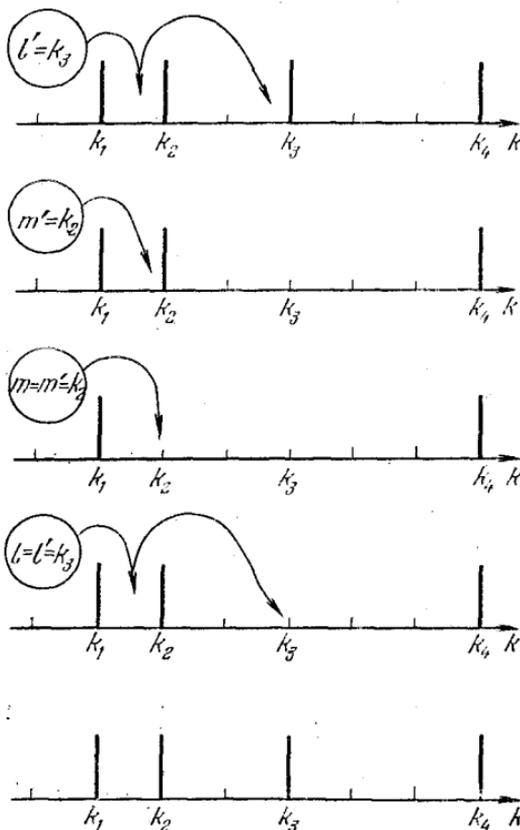


Рис. 30. К вычислению среднего значения (20.11).

димо исследовать, каким образом, применив операторы рождения $a_l^+ a_m^+$, можно восстановить старое состояние. Это возможно только в двух случаях:

$$\text{либо } m = m', \quad l = l', \quad (20.14)$$

$$\text{либо } m = l', \quad l = m'. \quad (20.15)$$

Для того чтобы посмотреть, не появляется ли какой-либо знак плюс или минус, вновь проведем все шаги по отдельности. В случае (20.14) старое состояние возникает благодаря тому, что рождение происходит точно в порядке, обратном уничтожению. Это означает, что перестановок сделано столько, что знак минус пропадает.

В случае (20.14) в качестве результата получаем для среднего значения (20.11) следующее выражение:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | a_l^+ a_m^+ a_m a_l | \Phi \rangle &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \text{ для } l \neq m, l' \neq m'; l, m = k_1, \dots, k_N, \\ &= 0 \quad \text{в остальных случаях.} \end{aligned} \quad (20.16)$$

Теперь рассмотрим второй случай (20.15). Ввиду того, что последовательность операторов рождения в (20.11) с индексами l и m изменена, этот случай сводится к предыдущему случаю (20.14), так что в результате получаем

$$\begin{aligned} \langle \Phi | a_l^+ a_m^+ a_m a_l | \Phi \rangle &= \\ = - \langle \Phi | a_m^+ a_l^+ a_m a_l | \Phi \rangle &= - \delta_{lm} \delta_{m'l'} \text{ для } l \neq m, l' \neq m'; l, m = \\ &= k_1, \dots, k_N, \\ &= 0 \quad \text{в остальных случаях.} \end{aligned} \quad (20.17)$$

Результаты (20.16) и (20.17) можно объединить и представить одной формулой

$$\left| \begin{aligned} \langle \Phi | a_l^+ a_m^+ a_m a_l | \Phi \rangle &= \{ \delta_{ll'} \delta_{mm'} - \delta_{lm'} \delta_{ml'} \} \text{ для } l \neq m, l' \neq m'; \\ & \quad l, m = k_1, \dots, k_N, \\ &= 0 \quad \text{в остальных случаях.} \end{aligned} \right. \quad (20.18)$$

Тем самым задача вычисления отдельных средних значений гамильтониана (20.7) решена. Используя результаты, полученные выше для средних значений, а именно (20.10) и (20.18), полу-

чаем окончательное выражение для полной энергии в виде

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi | H | \Phi \rangle = & \\
 & = \sum_{h_j} \int \varphi_{h_j}^*(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right\} \varphi_{h_j}(\mathbf{x}) d^3x + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{h_j, h_i} \int \int \varphi_{h_j}^*(\mathbf{x}) \varphi_{h_i}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_{h_i}(\mathbf{x}') \varphi_{h_j}(\mathbf{x}) d^3x d^3x' - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{h_j, h_i} \int \int \varphi_{h_j}^*(\mathbf{x}) \varphi_{h_i}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_{h_j}(\mathbf{x}') \varphi_{h_i}(\mathbf{x}) d^3x d^3x'. \quad (20.19)
 \end{aligned}$$

Суммы распространяются *только* на *занятые* состояния k_1, \dots, k_N .

Как уже отмечалось ранее, это выражение для полной энергии является функционалом отдельных волновых функций φ_k . Теперь определим эти волновые функции так, чтобы выражение для энергии (20.19) имело экстремальное значение. В качестве дополнительного условия следует предусмотреть нормировку волновых функций, которая выражается условием

$$\int \varphi_k^* \varphi_k d^3x = 1. \quad (20.20)$$

Для этого применим обычным образом параметр Лагранжа, который обозначим E . Проведение варьирования $\delta/\delta\varphi_k^*(\mathbf{x})$ выражения (20.19) с дополнительным условием (20.20) приводит непосредственно к уравнению¹⁾

$$\begin{aligned}
 \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right\} \varphi_k(\mathbf{x}) + \sum_{h_j} \int \varphi_{h_j}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \times \\
 \times \varphi_{h_j}(\mathbf{x}') d^3x' \varphi_k(\mathbf{x}) - \sum_{h_j} \int \varphi_{h_j}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \times \\
 \times \varphi_k(\mathbf{x}') d^3x' \varphi_{h_j}(\mathbf{x}) = E \varphi_k(\mathbf{x}). \quad (20.21)
 \end{aligned}$$

Для интерпретации уравнения Шредингера (20.21) рассмотрим входящие в него члены по отдельности. Оба члена в фигурных скобках представляют знакомую нам потенциальную и кинетическую энергии электрона в периодической решетке кристалла. Следующее выражение представляет произведение искомой волновой функции φ_k и суммы по k_j :

$$\varphi_k(\mathbf{x}) \tilde{V}(\mathbf{x}), \quad (20.22)$$

¹⁾ Читателю, незнающему с вариационным исчислением, напомним, что определение $\delta/\delta\varphi_k^*(\mathbf{x})$ (в другом обозначении $\delta/\delta q(x)$) детально обсуждалось в § 9.

причем

$$\tilde{V}(\mathbf{x}) = \sum_{h_j} \int |\varphi_{h_j}(\mathbf{x}')|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x'. \quad (20.22a)$$

Поскольку $|\varphi|^2 e$ имеет смысл плотности заряда, то сумма по k_j имеет смысл электростатического потенциала, вызванного распределением зарядов электронов в состояниях k_j . Последнее выражение в левой части (20.21) имеет вид

$$- \sum_{h_j} \varphi_{h_j}(\mathbf{x}) A_{h_j, h}(\mathbf{x}), \quad (20.23)$$

где

$$A_{h_j, h}(\mathbf{x}) = \int \varphi_{h_j}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_h(\mathbf{x}') d^3x'. \quad (20.23a)$$

Буква A указывает на то, что член (20.23) обусловлен «обменом» (по-немецки «Austausch») электронов. Если сравнить это выражение с (20.22), то можно увидеть, что в этом выражении волновая функция φ_h , которая ранее стояла за интегралом, теперь поменялась местами с волновой функцией φ_{h_j} под интегралом. Здесь речь идет, следовательно, о так называемом *обменном кулоновском взаимодействии*.

Суммы по k_j распространяются, как мы уже видели при введении этого выражения, только на занятые состояния. С помощью сокращенных обозначений (20.22) и (20.23) уравнение (20.21) может быть переписано в очень ясной форме

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) + \tilde{V}(\mathbf{x}) \right\} \varphi_h(\mathbf{x}) - \sum_{h_j} A_{h_j, h} \varphi_{h_j}(\mathbf{x}) = E \varphi_h(\mathbf{x}). \quad (20.24)$$

Отсюда еще раз следует, что $\tilde{V}(\mathbf{x})$ представляет собой дополнительный потенциал. Система уравнений (20.24) *нелинейна*, поскольку все волновые функции φ_h стоят также под суммами в виде множителей к φ_h . Для численного решения системы уравнений (20.24) был развит целый ряд методов, однако в задачу этой книги не входит подробное изложение этих методов, поскольку это не является предметом квантовой теории поля.

Обычный метод решения этой системы состоит в том, что, как уже было сказано, волновые функции нулевого приближения считаются известными, затем строится потенциал в том виде, в котором он входит в уравнение (20.24), а затем из получившегося интегро-дифференциального уравнения определяются новые волновые функции φ_h . Эти новые волновые функции затем служат исходным пунктом построения следующего приближения. Эта процедура сходится, если после нескольких повторений вновь получаются те же самые волновые функции, которые были заложены в предыдущем шаге (метод «самосогласованного поля»).

Уравнение Шредингера (20.24) можно переписать в кратком виде

$$H_{\text{эфф}} \varphi_h(\mathbf{x}) \equiv \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{эфф}}(\mathbf{x}) \right\} \varphi_h(\mathbf{x}) = E \varphi_h(\mathbf{x}), \quad (20.25)$$

причем следует ясно представлять себе, что $V_{\text{эфф}}$ не является обычным потенциалом, а содержит еще и обменный член. В общем случае можно лишь утверждать, что потенциал $V_{\text{эфф}}$ также является функцией, периодической с периодом решетки. (Поскольку блоховские функции применяются в ф «самосогласованном» образом.)

Уравнение (20.25) имеет в точности такой же вид, что и уравнение, положенное в основу теории Блоха в § 17. Поэтому все сделанные там высказывания относительно волновых функций, а также энергетическая схема остаются в силе и здесь, что позволяет дать лучшее обоснование зонной модели. Правда, не следует упускать из вида, что нами использована весьма специальная функция состояния, а именно (20.4), так что целый ряд эффектов нами не учтен. В последующем изложении на примерах будет показано, как могут быть рассмотрены эффекты, связанные с так называемой *корреляцией между электронами*.

В рамках рассматриваемого формализма до сих пор не уточнялось, насколько заполнены получившиеся зоны. Наше рассмотрение справедливо, в частности, для случая, когда валентная зона заполнена полностью и имеется еще один электрон в соседней зоне — зоне проводимости. Для более полной характеристики волновой функции (20.4) добавим к квантовому числу k еще квантовые числа V и L для валентной зоны и зоны проводимости соответственно. Для избыточного электрона (т. е. валентная зона заполнена и имеется только один электрон в зоне проводимости) волновая функция имеет следующий общий вид:

$$\Phi = a_{h,L}^+ \underbrace{(a_{h_1,V}^+ a_{h_2,V}^+ \dots a_{h_N,V}^+ \Phi_0)}_{\Phi_V}. \quad (20.26)$$

Поскольку находящееся в скобках выражение представляет функцию, которая описывает электроны в валентной зоне, кратко обозначим его через Φ_V и в последующем изложении будем писать функцию состояния избыточного электрона в виде

$$\Phi = a_{h,L}^+ \Phi_V. \quad (20.27)$$

Задание к § 20

Доказать следующие, справедливые для хартри-фоковской функции состояния Φ (20.4) и чрезвычайно важные для

приложений соотношения:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{x}_1) \psi^+(\mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_3) \psi(\mathbf{x}_4) | \Phi \rangle = \\ = \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{x}_1) \psi(\mathbf{x}_4) | \Phi \rangle \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_3) | \Phi \rangle - \\ - \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{x}_1) \psi(\mathbf{x}_3) | \Phi \rangle \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{x}_2) \psi(\mathbf{x}_4) | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A } 20.1)$$

Указание. Разложить ψ^+ , ψ согласно (20.2), (20.3), применить (20.4), а также (20.18). Приведем еще один промежуточный результат:

Если применять только числа заполнения $n_j = 1$ для $k = k_1, k_2, \dots, k_N$ (см. (20.4)) и $n_j = 0$ в остальных случаях, то левая часть (A 20.1) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \left\{ \sum_j n_j \varphi_j^*(\mathbf{x}_1) \varphi_j(\mathbf{x}_4) \right\} \left\{ \sum_{j'} n_{j'} \varphi_{j'}^*(\mathbf{x}_2) \varphi_{j'}(\mathbf{x}_3) \right\} - \\ - \left\{ \sum_j n_j \varphi_j^*(\mathbf{x}_1) \varphi_j(\mathbf{x}_3) \right\} \left\{ \sum_{j'} n_{j'} \varphi_{j'}^*(\mathbf{x}_2) \varphi_{j'}(\mathbf{x}_4) \right\}. \end{aligned}$$

Но это выражение в силу равенства

$$\sum_j n_j \varphi_j^*(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}') = \langle \Phi | \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}') | \Phi \rangle \quad (\text{A } 20.2)$$

совпадает с правой частью (A 20.1). Доказательство (A 20.2) проводится с помощью (20.10).

Примечание. В методе Хартри второе произведение в правой части (A 20.1) опускают.

§ 21. Электронные дырки *)

Благодаря формализму вторичного квантования мы теперь в состоянии особенно простым образом ввести понятие электронной дырки и осмыслить его математически.

При этом речь идет о следующей проблеме.

Будем исходить из *заполненной валентной зоны*, из которой удален электрон в состоянии k . Как будет показано, это *незаполненное состояние ведет себя точно как одна частица, однако с положительным зарядом*. Для математической формулировки будем исходить из полностью заполненной валентной зоны с волновой функцией Φ_v , в которой с помощью оператора уничтожения $a_{h,v}$ уничтожаем электрон в этом состоянии

$$\Phi_h = a_{h,v} \Phi_v. \quad (21.1)$$

*) В специальной литературе по физике полупроводников обычно употребляется термин «дырка». Однако мы будем придерживаться более близкого к оригиналу термина «электронная дырка», поскольку мы не предполагаем, что читатель знаком с физикой полупроводников. (Прим. перев.)

Поскольку, как будет видно, благодаря этой операции рождается электронная дырка, то вместо оператора уничтожения $a_{k,v}$ введем оператор рождения d и соответствующий оператор уничтожения с помощью соотношений

$$a_{k,v} = d_k^+, \quad a_{k,v}^+ = d_k. \quad (21.2)$$

Поскольку валентная зона занята, для оператора уничтожения d_k справедливы следующие соотношения:

$$d_k \Phi_V = a_{kV}^+ \Phi_V = 0. \quad (21.3)$$

Отсюда видно, что состояние Φ_V для оператора d_k представляет вакуумное состояние. Из построения оператора Гамильтона (20.7) нам известно, что операторы рождения в нем всегда стоят слева от операторов уничтожения. Поэтому имеет смысл переписать оператор Гамильтона через операторы электронных дырок таким образом, чтобы опять операторы рождения электронных дырок стояли слева от операторов уничтожения. Применяя перестановочные соотношения (13.4), (13.5), (13.6), получаем затем для пар операторов

$$d_l d_m^+ = \delta_{lm} - d_m^+ d_l. \quad (21.4)$$

После повторного применения указанных перестановочных соотношений для комбинации из четырех операторов получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} d_l d_m d_m^+ d_l^+ &= \delta_{mm'} \delta_{ll'} - \delta_{mm'} d_l^+ d_l - \delta_{m'l} \delta_{m'l'} + \\ &+ \delta_{m'l} d_m^+ d_l + \delta_{m'l} d_l^+ d_m - d_m^+ d_m \delta_{ll'} + d_m^+ d_l^+ d_l d_m. \end{aligned} \quad (21.5)$$

Поскольку все дальнейшие рассуждения в этом параграфе относятся к занятым или свободным состояниям в валентной зоне, мы отнесем оператор Гамильтона (20.7) к состояниям в валентной зоне, т. е. суммирование по l и m будет распространяться теперь только на квантовые числа валентной зоны. Стоящие здесь операторы можно заменить согласно (21.2) на операторы электронных дырок. Затем мы поменяем согласно соотношениям (21.4) и (21.5) порядок следования операторов. Как видно из представления (21.4) и (21.5), у нас появляются члены, которые более не зависят от операторов электронных дырок d , а именно, символы Кронекера δ_{lm} . После подстановки (21.4) и (21.5) в оператор Гамильтона (20.7) получим поэтому для энергии некоторое

постоянное выражение, которое имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 E_V = & \sum_l \int \varphi_l^*(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right\} \varphi_l(\mathbf{x}) d^3x + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{lm} \int \int \varphi_l^*(\mathbf{x}) \varphi_m^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_m(\mathbf{x}') \varphi_l(\mathbf{x}) d^3x d^3x' - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{lm} \int \int \varphi_l^*(\mathbf{x}) \varphi_m^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_l(\mathbf{x}') \varphi_m(\mathbf{x}) d^3x d^3x'. \quad (21.6)
 \end{aligned}$$

Если сравнить это выражение с выражением (20.19) и принять во внимание при этом, что суммирование теперь распространено на всю валентную зону, то становится непосредственно видно, что выражение (21.6) представляет энергию электронов валентной зоны в приближении Хартри — Фока. Это вполне разумный результат. Если подействовать полным гамильтонианом (20.7) после преобразований (21.4) и (21.5) на состояние заполненной валентной зоны Φ_V , то должна сразу получиться энергия заполненной валентной зоны. Теперь рассмотрим члены, содержащие пары операторов $d_m^+ d_l$. После простой перестановки индексов получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 - \sum_{lm} d_m^+ d_l \int \int \varphi_l^*(\mathbf{x}) \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right) \varphi_m(\mathbf{x}) + \right. \\
 \left. + \int \sum_{m'} \varphi_{m'}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_{m'}(\mathbf{x}') d^3x' \cdot \varphi_m(\mathbf{x}) - \right. \\
 \left. - \int \sum_{m'} \varphi_{m'}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_m(\mathbf{x}') d^3x' \cdot \varphi_{m'}(\mathbf{x}) \right\} d^3x. \quad (21.7)
 \end{aligned}$$

Суммы по индексам l , m , m' распространяются на всю валентную зону. Выражение в фигурных скобках нам уже встречалось в предыдущих параграфах. Оно является не чем иным, как левой частью уравнения Шредингера (20.21), приспособленного для электронов валентной зоны. Применяя обозначения (20.25), можно придать (21.7) следующий вид:

$$- \sum_{l,m} d_m^+ d_l \int \varphi_l^*(\mathbf{x}) H_{эфф} \varphi_m(\mathbf{x}) d^3x. \quad (21.8)$$

Поскольку, согласно соображениям предыдущих параграфов, волновые функции φ_m являются собственными функциями гамильтониана $H_{эфф}$ с собственным значением

$$E_m, \quad (21.9)$$

то (21.8) переходит в выражение

$$-\sum_{l,m} d_m^+ d_l E_m \int \varphi_l^*(x) \varphi_m(x) d^3x. \quad (21.10)$$

Ввиду ортогональности волновых функций, в сумме остаются только диагональные члены, так что вместо (21.7) получаем следующее выражение:

$$-\sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},V}. \quad (21.11)$$

Здесь введен индекс \mathbf{k} вместо употреблявшегося ранее индекса m , так как собственные функции φ_m имеют вид блоховских функций, которые различаются волновыми векторами. Другой индекс V должен подчеркнуть, что речь идет об энергии электрона в валентной зоне. Выражение (21.11) имеет в точности вид оператора Гамильтона системы независимых отдельных частиц. С гамильтонианом подобного вида мы уже познакомились для случая свободных частиц в § 13. Напомним теперь кратко последовательность наших действий. С помощью правил (21.2) и перестановочных соотношений (21.4) и (21.5) электронные операторы в гамильтониане (20.7) § 20 были заменены операторами электронных дырок. До этого момента мы рассматривали только те члены, которые не зависят от операторов электронных дырок или содержат только пары таких операторов, что привело к выражениям (21.6) и (21.11). Как следует из (21.5), имеются еще операторы, содержащие произведения четырех операторов электронных дырок, откуда возникает выражение, которое описывает кулоновское взаимодействие между электронными дырками:

$$H_{d-d} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l,m \\ l',m'}} d_m^+ d_l^+ d_l d_m W(l, m | m', l'), \quad (21.12)$$

где

$$W(l, m | m', l') = \iint \varphi_l^*(x) \varphi_m^*(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \varphi_{m'}(x') \varphi_{l'}(x) d^3x d^3x'. \quad (21.12a)$$

(Индекс $d-d$ у H указывает на взаимодействие между дырками.) Объединяя (21.6), (21.11) и (21.12), получаем

Оператор Гамильтона электронных дырок. (Ниже обычные квантовые числа l, m, l', m' заменены на волновые векторы \mathbf{k} блоховских волн.)

$$H = E_V - \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k},V} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_1}^+ d_{\mathbf{k}_2}^+ d_{\mathbf{k}_3} d_{\mathbf{k}_4} W(\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 | \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2). \quad (21.13)$$

В этом выражении E_V является энергией заполненной зоны, а второй член представляет энергию электронных дырок без учета их взаимодействия между собой. Последний член, наконец, описывает кулоновское взаимодействие между электронными дырками и представлен выражением (21.12).

В последующем изложении кулоновское взаимодействие между электронными дырками мы опустим и обсудим выражение (21.11). Сначала при поверхностном взгляде могло бы показаться, что энергия электронной дырки отрицательна, так что ее нельзя сравнивать со свободной частицей. Однако максимум энергии типичной валентной зоны (см. рис. 27) находится точно в точке $k=0$. Если теперь разложить энергию вблизи точки $k=0$ в ряд, то энергия примет вид

$$E_{k,V} = E_{0,V} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_V}, \quad m_V > 0. \quad (21.14)$$

Опуская неинтересный постоянный член в (21.13), получим, наконец, следующее выражение для оператора Гамильтона электронных дырок:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_V} - E_{0,V} \right). \quad (21.15)$$

Таким образом, становится очевидным, что электронные дырки ведут себя как частицы с положительной эффективной массой m_V .

Отсюда, однако, еще не следует, что электронные дырки как сами по себе, так и под действием внешнего поля ведут себя как частицы с противоположным электрону, т. е. положительным, зарядом. Для того чтобы показать это, рассмотрим оператор плотности электронного заряда, который с помощью проведенных в § 12 рассуждений можно сразу представить в виде

$$\rho(\mathbf{x}) = e\psi^{\dagger}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}). \quad (21.16)$$

Если подставить сюда еще разложение оператора ψ по зонным функциям, то получим

$$\rho(\mathbf{x}) = e \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'}. \quad (21.17)$$

Будем считать, что сумма в (21.17) распространяется на все состояния валентной зоны. Чтобы перейти к электронным дыркам, вновь воспользуемся соотношением (21.2) и поменяем, согласно (21.4), порядок следования операторов так, чтобы операторы уничтожения электронных дырок вновь оказались справа. Тогда для оператора зарядовой плотности, который выражен

теперь через операторы электронных дырок, получаем следующее выражение:

$$\rho(\mathbf{x}) = e \sum_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|^2 - e \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}. \quad (21.18)$$

Первая сумма в этом выражении представляет собой, очевидно, плотность заряда всей заполненной электронами валентной зоны. Поскольку кристалл в целом нейтрален, следует принять, что эта зарядовая плотность компенсируется положительно заряженными ядрами. Итак, теперь остается лишь вторая сумма, в которой, впрочем, изменен порядок следования индексов. Эта сумма имеет структуру, полностью аналогичную выражению (21.17), которое относится к электронам, только знак заряда, очевидно, изменен на противоположный. Проверим, действительно ли среднее значение этого выражения представляет собой плотность заряда, учитывая, естественно, что заряд электрона отрицателен. Для этого вычислим среднее значение дырочной части выражения (21.18) для электронной дырки в состоянии k_0 :

$$\langle \rho \rangle = \left\langle \Phi_{k_0} \left| (-e) \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \right| \Phi_{k_0} \right\rangle \quad (21.19)$$

при

$$\Phi_{k_0} = a_{k_0}^{\dagger} \Phi_V. \quad (21.20)$$

Ход решения повторяет предыдущие вычисления этой главы и непосредственно приводит к результату

$$\langle \rho \rangle = -e |\varphi_{k_0}|^2. \quad (21.21)$$

При этом, подчеркнем это еще раз, зарядовая плотность заполненной зоны, ввиду ее компенсации зарядами ядер, опущена.

В заключение покажем, что заряд электронной дырки в выражении, описывающем взаимодействие с внешним полем, меняет свой знак на обратный. Для этого в качестве примера рассмотрим постоянное электрическое поле. Выражение оператора потенциальной энергии тогда, согласно приведенным в § 12 рецептам, имеет вид

$$V_{\text{поле}} = \int \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) (-eE\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3x. \quad (21.22)$$

Вновь подставим разложения (20.2), (20.3), после чего сразу получим

$$V_{\text{поле}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'}, \quad (21.23)$$

причем матричные элементы $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ даются выражением

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int \varphi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}) (-eE\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) d^3x. \quad (21.24)$$

Теперь проведем преобразования (21.2) и (21.4), тогда сразу получаем

$$V_{\text{поле}} = \sum_{\mathbf{k}} M_{\mathbf{k}\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} (M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'})^*. \quad (21.25)$$

Первая сумма вновь представляет собой потенциальную энергию заполненной зоны в электрическом поле. Здесь также можно вновь предположить компенсацию заряда остовом решетки, так что важным для нас остается второй член в выражении (21.25). Также и здесь, очевидно, знак меняется на противоположный. Это выглядит, следовательно, так, как будто поменялся знак заряда.

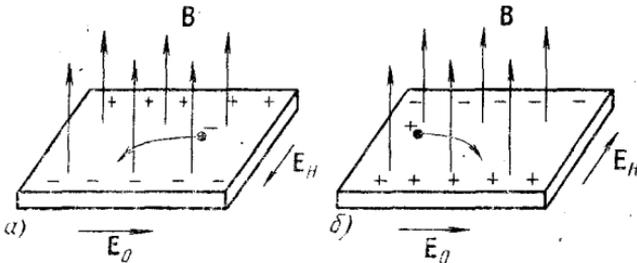


Рис. 31. а) В эффекте Холла носители заряда испытывают отклонение при движении в скрещенных электрическом и магнитном полях. Благодаря накоплению заряда возникает разность потенциалов Холла. б) Аномальный эффект Холла можно понять, предположив, что заряды имеют положительный знак.

Как можно видеть из предыдущего изложения, обращение знака электрического заряда электронной дырки является простым следствием свойств перестановочных соотношений. С другой стороны, существование электронных дырок доказано многими экспериментами, в особенности аномальным эффектом Холла (рис. 31). Все это дает прекрасный пример того, как на основе простых закономерностей квантотеоретического рассмотрения можно прийти к далеко идущим физическим следствиям, которые оказываются чрезвычайно важными для приложений (вспомним, например, транзисторы).

§ 22. Взаимодействие между электронами и дырками

Рассмотрим кристалл, обладающий полупроводниковыми свойствами, т. е. примем, что в основном состоянии этого кристалла валентная зона полностью занята электронами, а зона проводимости, напротив, пустая. В этом параграфе будет исследован вопрос о том, какие эффективные взаимодействия возникнут, если удалить некоторые электроны из валентной зоны, т. е. создать в ней электронные дырки и одновременно перене-

сти несколько электронов в зону проводимости. Физически это может происходить, например, при облучении кристалла светом, в результате чего электроны из валентной зоны выбиваются в зону проводимости. Очевидно, что при этом число появившихся в зоне проводимости электронов равно числу электронных дырок в валентной зоне. Можно, однако, впрыснуть в кристалл носители заряда внешним током, так что в последующем изложении мы примем, что число электронов в зоне проводимости может отличаться от числа электронных дырок в валентной зоне. Исходным пунктом нашего рассмотрения, как обычно, является уравнение Шредингера

$$H\Phi = E\Phi \quad (22.1)$$

с оператором Гамильтона

$$H = \int \psi^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(x) \right) \psi(x) d^3x + \\ + \frac{1}{2} \iint \psi^+(x) \psi^+(x') \frac{e^2}{|x-x'|} \psi(x') \psi(x) d^3x d^3x', \quad (22.2)$$

который уже встречался нам и поэтому не требует более пояснений. Поскольку мы хотим рассмотреть состояния в валентной зоне и зоне проводимости в явном виде, разложим операторы поля по собственным функциям валентной зоны и зоны проводимости

$$\psi^+(x) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},V}^+ \varphi_{\mathbf{k},V}^*(x) + \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},L}^+ \varphi_{\mathbf{k},L}^*(x), \quad (22.3)$$

$$\psi(x) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},V} \varphi_{\mathbf{k},V}(x) + \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},L} \varphi_{\mathbf{k},L}(x). \quad (22.4)$$

При этом предположим, что эти волновые функции в валентной зоне и зоне проводимости определены с помощью некоторого эффективного гамильтониана

$$H_{\text{эфф}} \varphi(x) = E \varphi(x), \quad (22.5)$$

где

$$H_{\text{эфф}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{эфф}}(x). \quad (22.5a)$$

Этот оператор Гамильтона встречался нам в предпоследнем параграфе (§ 20) и мы полагаем, что нам удалось определить волновые функции $\varphi_{\mathbf{k},V}$ и $\varphi_{\mathbf{k},L}$, что, как уже было отмечено, не является задачей квантовополевой теории, а должно быть представлено специалистам по вычислению зонной структуры.

Для дальнейшего предположим, что волновые функции φ взаимно ортогональны:

$$\int \varphi_{\mathbf{k},i}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}',j}(\mathbf{x}) d^3x = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ij}. \quad (22.6)$$

Коэффициенты разложения a и a^+ в (22.3), (22.4) вновь, естественно, являются операторами, которые удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$a_{\mathbf{k},i} a_{\mathbf{k}',j} + a_{\mathbf{k}',j} a_{\mathbf{k},i} = 0, \quad a_{\mathbf{k},i}^+ a_{\mathbf{k}',j}^+ + a_{\mathbf{k}',j}^+ a_{\mathbf{k},i}^+ = 0, \quad (22.7)$$

$$a_{\mathbf{k},i} a_{\mathbf{k}',j}^+ + a_{\mathbf{k}',j}^+ a_{\mathbf{k},i} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ij}.$$

В соответствии с двумя слагаемыми в (22.2), разложим оператор Гамильтона на часть, описывающую свободное движение частиц, и на часть, которая описывает взаимодействие:

$$H = H_0 + H_{вз}. \quad (22.8)$$

Если подставить разложения (22.3) и (22.4) в соответствующие выражения, то для H_0 получим следующее выражение:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', i, j} a_{\mathbf{k},i}^+ a_{\mathbf{k}',j} \int \varphi_{\mathbf{k},i}^*(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mathbf{k}',j}(\mathbf{x}) d^3x, \quad (22.9)$$

$$i, j = L, V.$$

Ввиду трансляционной симметрии задачи, двойное суммирование по \mathbf{k} и \mathbf{k}' переходит в однократное. Индексы i и j могут принимать оба значения: L (зона проводимости) и V (валентная зона). Второе стоящее в (22.8) слагаемое, которое связано с взаимодействием, после подстановки разложений (22.3) и (22.4) принимает вид

$$H_{вз} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \\ j_1 j_2 j_3 j_4}} a_{\mathbf{k}_1, j_1}^+ a_{\mathbf{k}_2, j_2}^+ a_{\mathbf{k}_3, j_3} a_{\mathbf{k}_4, j_4} \times$$

$$\times \iint \varphi_{\mathbf{k}_1, j_1}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}_2, j_2}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_{\mathbf{k}_3, j_3}(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}_4, j_4}(\mathbf{x}) d^3x d^3x'. \quad (22.10)$$

Последующая процедура в принципе очень проста. Вместо электронных операторов валентной зоны вводим операторы электронных дырок согласно соотношениям

$$a_{\mathbf{k},V} = d_{\mathbf{k}}^+, \quad a_{\mathbf{k},V}^+ = d_{\mathbf{k}}. \quad (22.11)$$

Для упрощения обозначений опустим в дальнейшем у операторов, относящихся к электронам проводимости, индекс L :

$$a_{\mathbf{k},L} \equiv a_{\mathbf{k}}, \quad a_{\mathbf{k},L}^+ \equiv a_{\mathbf{k}}^+.$$

В последующем изложении будет сделано одно дополнительное приближение. А именно, будем считать, что количества электронов в зоне проводимости и валентной зоне независимы друг от друга. Это предположение на первый взгляд может показаться само собой разумеющимся, поскольку мы не рассматриваем реальные переходы между валентной зоной и зоной проводимости, т. е. считается, что акты рождения электронов и электронных дырок уже закончены. Мы рассматриваем только поведение уже созданных электронов и электронных дырок. Следует, однако, подчеркнуть, что, несмотря на кажущуюся очевидность этого предположения, здесь идет речь о существенном приближении, согласно которому мы пренебрегаем так называемыми виртуальными переходами. Дело в том, что под влиянием взаимодействия устанавливаются поляризационные эффекты, при которых, например, функции электронов в валентной зоне накладываются на функции электронов в зоне проводимости, что, однако, не сопровождается реальным переходом. Эффекты такого рода будут обстоятельно обсуждены позже в § 25, теперь же мы обратимся к расчету. Формализм этого расчета состоит в том, что согласно (22.11) вводятся операторы электронных дырок, затем оператор Гамильтона преобразуется таким образом, чтобы все операторы уничтожения стояли справа. Согласно нашим предположениям проведем в H_0 следующие упрощения и преобразования:

$$\text{для } i = j = L: a_{k,L}^+ a_{k,L} \equiv a_k^+ a_k, \quad (22.12)$$

$$\text{для } i = j = V: a_{k,V}^+ a_{k,V} = 1 - d_k^+ d_k. \quad (22.13)$$

В $H_{\text{вз}}$ следует предусмотреть все возможные комбинации индексов, а именно следующие:

1. Все индексы принадлежат зоне проводимости:

$$j_1 = j_2 = j_3 = j_4 = L. \quad (22.14)$$

2. Все индексы принадлежат валентной зоне:

$$j_1 = j_2 = j_3 = j_4 = V. \quad (22.15)$$

3. Два индекса принадлежат валентной зоне и два — зоне проводимости. При этом, однако, речь идет не о таких комбинациях, когда одновременно рождаются две частицы в зоне проводимости и две в валентной зоне, а о таких комбинациях, когда одна частица уничтожается и одна рождается в зоне проводимости и одна частица уничтожается и одна рождается в валентной зоне. Это дает следующие комбинации индексов:

$$\left\{ \begin{array}{ll} j_1 = j_4 = V & j_2 = j_3 = L \\ j_2 = j_3 = L & j_1 = j_4 = V \end{array} \right\}, \quad (22.16)$$

которые, как будет показано, дают равные вклады, а также

следующие комбинации индексов:

$$\left\{ \begin{array}{l} j_1 = j_3 = V \quad j_1 = j_3 = L \\ j_2 = j_4 = L \quad j_2 = j_4 = V \end{array} \right\}, \quad (22.17)$$

которые равным образом дают одинаковые вклады. Для последующего введем краткое обозначение матричного элемента, описывающего кулоновское взаимодействие:

$$\left| \int \int \varphi_{k_1, j_1}^*(\mathbf{x}) \varphi_{k_2, j_2}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \varphi_{k_3, j_3}(\mathbf{x}') \varphi_{k_4, j_4}(\mathbf{x}) d^3x d^3x' = \right. \\ \left. = W \left(\begin{array}{cc|cc} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \end{array} \right). \quad (22.18) \right.$$

Верхний ряд индексов в W относится к векторам \mathbf{k} , а нижний ряд — к индексам зоны проводимости или валентной зоны. Согласно комбинациям индексов (22.14) и (22.17) имеются разные вклады в оператор взаимодействия, а именно: взаимодействия в валентной зоне, взаимодействия в зоне проводимости и взаимодействия между зоной проводимости и валентной зоной:

$$H_{vz} = H_{LL} + H_{VV} + H_{LV}. \quad (22.19)$$

В соответствии с (22.19) получаем следующие вклады:

1. *Взаимодействие между электронами зоны проводимости:*

$$H_{LL} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} W \left(\begin{array}{cc|cc} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ L & L & L & L \end{array} \right). \quad (22.20)$$

2. *Взаимодействие между электронными дырками:*

$$H_{VV} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_1} d_{\mathbf{k}_2} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_4}^+ W \left(\begin{array}{cc|cc} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ V & V & V & V \end{array} \right). \quad (22.21)$$

Если в этом выражении перенести операторы уничтожения направо, то вновь получатся выражения, уже известные нам из предыдущей главы об электронных дырках. H_{VV} можно далее представить в следующем виде:

$$H_{VV} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \{ \delta_{k_2 k_3} \delta_{k_1 k_4} - \delta_{k_1 k_3} \delta_{k_2 k_4} - \delta_{k_2 k_3} d_{\mathbf{k}_1}^+ d_{\mathbf{k}_4} + \\ + \delta_{k_1 k_3} d_{\mathbf{k}_2}^+ d_{\mathbf{k}_4} + \delta_{k_2 k_4} d_{\mathbf{k}_1}^+ d_{\mathbf{k}_3} - \delta_{k_1 k_4} d_{\mathbf{k}_2}^+ d_{\mathbf{k}_3} + \\ + d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_4}^+ d_{\mathbf{k}_1} d_{\mathbf{k}_2} \} W \left(\begin{array}{cc|cc} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ V & V & V & V \end{array} \right). \quad (22.22)$$

Обсудим отдельные члены этого выражения от A до G , причем для этого будет необходимо вычислить множитель $W \left(\begin{array}{cc|cc} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ V & V & V & V \end{array} \right)$. Член A вновь дает кулоновское взаимодействие в заполненной

валентной зоне и, естественно, экспериментально необнаружим. Член B представляет кулоновское обменное взаимодействие в заполненной валентной зоне, в то время как член C дает взаимодействие электронных дырок с валентными электронами, а D представляет соответствующее кулоновское обменное взаимодействие. Последующие члены совпадают с предыдущими: $E = D$, $F = C$. Наконец, последний член представляет кулоновское взаимодействие между двумя электронными дырками. Члены C и D уже встречались нам в § 20 (и § 21). Как мы тогда видели, здесь речь идет о вкладе эффективного потенциала, который привлекается для определения волновых функций зоны с помощью метода самосогласованного поля. Эти члены для нас теперь не представляют интереса, за исключением одного только члена G .

3. Рассмотрим важнейший член, описывающий взаимодействие между электронами проводимости и электронными дырками. Согласно табличкам (22.16) и (22.17), в нем присутствуют два разнородных члена. Исследуем выражение

$$H_{LV} = \frac{1}{2} \sum a_{k_1 j_1}^+ a_{k_2 j_2}^+ a_{k_3 j_3} a_{k_4 j_4} W \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \end{pmatrix}, \quad (22.23)$$

где на индексы $j_1 \dots j_4$ наложены ограничения (22.16) или (22.17). Нам нужно, следовательно, рассмотреть вклады по следующей схеме:

$$\left. \begin{aligned} L V V L &\rightarrow a_{k_1}^+ a_{k_4} d_{k_2} d_{k_3}^+ \\ V L L V &\rightarrow a_{k_2}^+ a_{k_3} d_{k_1} d_{k_4}^+ \end{aligned} \right\} \quad (22.24)$$

$$\left. \begin{aligned} L V L V &\rightarrow -a_{k_1}^+ a_{k_3} d_{k_2} d_{k_4}^+ \\ V L V L &\rightarrow -a_{k_2}^+ a_{k_4} d_{k_1} d_{k_3}^+ \end{aligned} \right\} \quad (22.25)$$

Покажем, что вклады в (22.23) от комбинаций (22.24) идентичны и что то же самое справедливо для второй группы вкладов от (22.25). Для этого изменим индексы в сумме (22.23) следующим образом: k_1 заменим на k_2 , k_2 на k_1 , k_3 на k_4 и k_4 на k_3 . Тем самым вторая строка в (22.24) переходит в первую строку. Одновременно матричный элемент W в (22.23) переходит в новый матричный элемент:

$$W \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ L & V & V & L \end{pmatrix} \rightarrow W \begin{pmatrix} k_2 & k_1 & k_4 & k_3 \\ V & L & L & V \end{pmatrix}, \quad (22.26)$$

причем в явном выражении для матричного элемента следует поменять координаты

$$x \rightarrow x'. \quad (22.27)$$

Самое важное теперь состоит в том, что, как можно сразу же

убедиться с помощью явного выражения (22.18), оба матричных элемента в (22.26) равны друг другу. То же самое можно показать и для комбинаций (22.25). Таким образом, для последующего достаточно, если мы ограничимся первыми комбинациями (22.24) и (22.25), а оставшиеся комбинации учтем просто введением в сумму (22.23) множителя 2. Выражение для взаимодействия согласно первой строке (22.24) можно затем преобразовать хорошо известным нам образом с помощью перестановочных соотношений для электронных дырок, в результате чего получим

$$H_{LV}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ L & V & V & L \end{array} \right) - \\ - \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_2} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ L & V & V & L \end{array} \right). \quad (22.28)$$

Первая сумма здесь описывает взаимодействие электрона в зоне проводимости с заполненной валентной зоной. Это станет видно особенно отчетливо, если несколько преобразовать это выражение, используя стоящие в нем символы Кронекера. Тогда для первой части выражения (22.28) получаем

$$\sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_4} \sum_{\mathbf{k}} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k} & \mathbf{k} & \mathbf{k}_4 \\ L & V & V & L \end{array} \right). \quad (22.29)$$

Для того чтобы сделать это выражение полностью очевидным, воспользуемся явным видом W , представленным в (22.18), после чего получим

$$\sum_{\mathbf{k}} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k} & \mathbf{k} & \mathbf{k}_4 \\ L & V & V & L \end{array} \right) = \\ = \int \Phi_{\mathbf{k}_1, L}^*(\mathbf{x}) \left\{ \sum_{\mathbf{k}'} |\Phi_{\mathbf{k}, V}(\mathbf{x}')|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' \right\} \Phi_{\mathbf{k}_4, L}(\mathbf{x}) d^3 x. \quad (22.30)$$

Это выражение показывает, как уже говорилось, что первая сумма в (22.28) представляет собой энергию взаимодействия электрона проводимости с заполненной валентной зоной. Второе выражение в (22.28) описывает уничтожение и последующее рождение электронной дырки и одновременно тем самым уничтожение и последующее рождение электрона. Это выражение, таким образом, описывает рассеяние электрона на электронной дырке, которое обусловлено кулоновским взаимодействием. Это рассеяние в рамках нашего формализма заключено в выражении взаимодействия W . Аналогичным образом можно описать ту часть

оператора взаимодействия (22.23), которая обусловлена (22.25). Отсюда сразу получаем

$$H_{LV}^{(2)} = - \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3} W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 \\ V & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & L \end{matrix} \right) + \\ + \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_1} W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 \\ V & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & L \end{matrix} \right). \quad (22.31)$$

Первую сумму в этом выражении можно интерпретировать как *обменное взаимодействие электрона в зоне проводимости с заполненной валентной зоной*, а вторая сумма является для нас очень важной, поскольку она описывает *кулоновское обменное взаимодействие между электроном в зоне проводимости и электронной дыркой*. То, что здесь действительно речь идет об *обменном взаимодействии*, станет ясно, если исследовать явное представление (22.18) для W . При этом можно установить, что для равных значений \mathbf{k} в валентной зоне, т. е. для $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_3$, и для равных значений \mathbf{k} в зоне проводимости, т. е. для $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4$, появляется смешанная зарядовая плотность. Проведенные нами выше рассуждения были довольно элементарны, однако, естественно, несколько длинноваты. Поэтому следует еще раз посмотреть, чего же мы достигли в результате всех этих преобразований. Задача состояла в том, чтобы вместо электронных операторов в валентной зоне ввести соответствующие операторы электронных дырок. При этом получились совершенно различные вклады, которые следует теперь поставить в соответствие различным физическим процессам. Объединим полученные выше результаты в общий оператор Гамильтона для электронов и электронных дырок следующим образом:

$$H = H_0 + H_{вз} = H_{эл} + H_{д} + H_{эл-д} + H_{эл-эл} + H_{д-д} + W_{заполн.} \quad (22.32)$$

Индексы эл (= электрон) и д (= дырка) указывают на то, какие операторы появляются в отдельных членах H . Рассмотрим теперь отдельные вклады, которые получим соответствующим применением выведенных выше выражений:

$$H_{эл} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \left\{ \int \varphi_{\mathbf{k},L}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mathbf{k},L} d^3x + \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ W \left(\begin{matrix} \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ L & V \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}' & \mathbf{k} \\ V & L \end{matrix} \right) - W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}' & \mathbf{k} \\ V & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ V & L \end{matrix} \right) \right\} \right\}. \quad (22.33)$$

Этот член описывает *энергию электронов в зоне проводимости* (однако без учета взаимодействия электронов друг с другом или с электронными дырками). Это выражение уже было найдено нами в § 20 и там же обсуждено. Мы можем, учитывая трансляционную симметрию, положить $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4$. Для электронных дырок

мы получим совершенно аналогичное выражение (без учета взаимодействия дырок между собой или с электронами)

$$H_d = - \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} \left\{ \varphi_{\mathbf{k},V}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mathbf{k},V} d^3x + \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k} & \mathbf{k}' & \mathbf{k}' & \mathbf{k} \\ V & V & V & V \end{array} \right) - W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}' & \mathbf{k} & \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ V & V & V & V \end{array} \right) \right\} \right\}. \quad (22.34)$$

И это выражение также встречалось нам уже ранее в § 21. Следующее выражение имеет основополагающее значение для рассмотрения свойств полупроводников. А именно, оно описывает взаимодействие между электронами и электронными дырками

$$H_{\text{эл-д}} = \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} (-1) a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_2} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ L & V & V & L \end{array} \right) + \\ + \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_1} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & L & V & L \end{array} \right). \quad (22.35)$$

Здесь важен указанный в первой сумме в явном виде знак минус, который наглядно можно интерпретировать следующим образом: в кулоновском взаимодействии, которое пропорционально квадрату заряда e , один из знаков поменялся на противоположный, что означает, как мы уже видели ранее, что заряд электронной дырки является положительным. Три последних члена в (22.32) интерпретируются особенно просто. Эти члены суть следующие:

электрон-электронное взаимодействие в зоне проводимости:

$$H_{\text{эл-эл}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ L & L & L & L \end{array} \right), \quad (22.36)$$

взаимодействие между электронными дырками в валентной зоне:

$$H_{\text{д-д}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_4}^+ d_{\mathbf{k}_1} d_{\mathbf{k}_2} W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & V & V & V \end{array} \right) \quad (22.37)$$

и, наконец, постоянный член, не содержащий никаких операторов:

$$W_{\text{заполн}} = \sum_{\mathbf{k}} \int \varphi_{\mathbf{k},V}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mathbf{k},V} d^3x + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left\{ W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k} & \mathbf{k}' & \mathbf{k}' & \mathbf{k} \\ V & V & V & V \end{array} \right) - W \left(\begin{array}{cc|cc} \mathbf{k} & \mathbf{k}' & \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ V & V & V & V \end{array} \right) \right\}, \quad (22.38)$$

который описывает просто энергию заполненной валентной зоны.

В заключение рассмотрим еще стоящие в формулах для вкладов в энергию (22.33) и (22.34) довольно длинные выражения в фигурных скобках. Эти выражения, как можно установить при ближайшем рассмотрении, уже встречались нам в §§ 20 и 21 и представляют средние значения энергий электронов и электронных дырок. Приведем эти выражения еще раз, чтобы читателю не возвращаться назад,

$$\int \varphi_{\mathbf{k},L}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mathbf{k},L} d^3x + \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ W \begin{pmatrix} \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ L & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{k}' & \mathbf{k} \\ V & L \end{pmatrix} - W \begin{pmatrix} \mathbf{k}' & \mathbf{k} \\ V & L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ V & L \end{pmatrix} \right\} = E_{\mathbf{k},L} \quad (22.39)$$

и

$$\int \varphi_{\mathbf{k},V}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_{\mathbf{k},V} d^3x + \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ W \begin{pmatrix} \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ V & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{k}' & \mathbf{k} \\ V & V \end{pmatrix} - W \begin{pmatrix} \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ V & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{k} & \mathbf{k}' \\ V & V \end{pmatrix} \right\} = E_{\mathbf{k},V}. \quad (22.40)$$

В большинстве важных в экспериментальном отношении случаев можно принять, что электроны и дырки находятся вблизи края зоны. Поэтому энергию $E_{\mathbf{k},L}$ сразу же можно разложить в ряд

$$E_{\mathbf{k},L} = E_{0,L} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_L}. \quad (22.39a)$$

Соответственно разложение энергии $E_{\mathbf{k},V}$ принимает вид

$$E_{\mathbf{k},V} = E_{0,V} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_V}. \quad (22.40a)$$

Если же минимумы вырождены и находятся в точках $k \neq 0$, то и в этом случае можно, естественно, провести соответствующие разложения. Мы не будем, однако, углубляться в такие тонкости, так как все это не имеет отношения к фундаментальным методам квантовополевой теории. Гамильтониан H может служить исходным пунктом для рассмотрения целого ряда чрезвычайно важных в физическом отношении проблем. В последующем изложении мы особо выделим случай, когда в соответствующих зонах находятся один электрон и одна электронная дырка. Мы увидим затем, что при этом сразу появляется совершенно новое состояние, так называемый экситон.

Исследование свойств гамильтониана системы *многих* электронов и электронных дырок в последнее время также приобре-

ло актуальность, поскольку благодаря высокой интенсивности лазеров оказалось возможным переводить большое число электронов из валентной зоны в зону проводимости. К этому вопросу мы еще вернемся в § 26 об «экситонной материи».

§ 23. Экситоны с большим радиусом (экситоны Ванье)

В предыдущих параграфах мы ввели оператор Гамильтона для следующей проблемы: в зоне проводимости находится определенное число электронов, а валентная зона занята другим количеством электронных дырок. Как мы уже видели, электроны и электронные дырки можно описать как свободные частицы с определенной эффективной массой. Между этими частицами, однако, действуют кулоновские силы. Оператор Гамильтона для такой системы имел следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{общ}} = & W_{\text{заполн}} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_L} + E_{0,L} \right) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_V} - E_{0,V} \right) \cdot d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} - \\
 & - \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_2} \left\{ W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 \\ L & V \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & L \end{matrix} \right) - W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_1 \\ V & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & L \end{matrix} \right) \right\} + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 \\ L & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ L & L \end{matrix} \right) + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_4}^+ d_{\mathbf{k}_1} d_{\mathbf{k}_2} W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 \\ V & V \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & V \end{matrix} \right). \quad (23.1)
 \end{aligned}$$

В этом выражении первый член представляет энергию полностью заполненной валентной зоны. Второй член представляет кинетическую энергию электронов в зоне проводимости, третий член — кинетическую энергию электронных дырок в валентной зоне. Следующий член описывает взаимодействие между электронной дыркой и электроном. Стоящие в фигурных скобках матричные элементы W определены в выражении (22.18) и описывают кулоновское взаимодействие и кулоновское обменное взаимодействие. Предпоследний член описывает взаимодействие между электронами в зоне проводимости; наконец, последний член представляет взаимодействие между электронными дырками в валентной зоне. Далее, наша задача состоит, естественно, в том, чтобы решить соответствующее уравнение Шредингера

$$H_{\text{общ}} \Phi = E \Phi. \quad (23.2)$$

В следующем параграфе это решение будет проведено в явном виде для случая одного электрона в зоне проводимости и одной

электронной дырки в валентной зоне. Волновые функции электрона в состоянии k_1 и электронной дырки в состоянии k_2 можно получить из состояния, описывающего полностью занятую валентную зону, последовательным действием операторов рождения $a_{k_1}^+$ и $d_{k_2}^+$ на функцию заполненной валентной зоны Φ_V :

$$a_{k_1}^+ d_{k_2}^+ \Phi_V. \quad (23.3)$$

Следует ожидать, что электрон и электронная дырка, пролетая друг относительно друга, испытывают взаимное рассеяние, в результате чего попадают во все возможные различные конечные состояния k . Поэтому образуем сумму по всем состояниям k электрона и электронной дырки. Поскольку, к тому же, отдельные состояния могут быть заняты с различной вероятностью, введем некоторые весовые коэффициенты c_{k_1, k_2} , которые затем подлежат определению. Согласно этим соображениям наш подход к системе двух частиц, так называемому экситону, оказывается основанным на волновой функции

$$\left| \Phi = \sum_{k_1 k_2} c_{k_1, k_2} a_{k_1}^+ d_{k_2}^+ \Phi_V. \quad (23.4) \right.$$

Исследуем теперь, какие возникнут упрощения, если подействовать оператором Гамильтона (23.1) на функцию состояния (23.4). В операторе Гамильтона (23.1) обе последние суммы описывают взаимодействие только в валентной зоне или только в зоне проводимости и содержат, соответственно этому, два оператора уничтожения для электронов и электронных дырок. Поскольку, однако, наша функция состояния (23.4) содержит по одному электрону и электронной дырке, то действие соответствующих операторов взаимодействия дает нуль, так что обе последние суммы в (23.1) можно опустить..

Укороченный таким образом оператор Гамильтона (23.1) разложим, как обычно, на две части: кинетическую энергию и взаимодействие между электроном и электронной дыркой (для того чтобы опустить $W_{\text{заполн}}$, сдвинем соответствующим образом энергию E):

$$\left| H_{\text{общ}} = H_{\text{кин}} + H_{\text{эл-д}}. \quad (23.5) \right.$$

Учитывая явный вид $H_{\text{кин}}$ и волновой функции (23.4), получим

$$\left| H_{\text{кин}} \Phi = \sum_{k_1 k_2} c_{k_1, k_2} \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_V} + \text{const} \right) \cdot a_{k_1}^+ d_{k_2}^+ \Phi_V, \right.$$

$$\text{const} = E_{0,L} - E_{0,V}, \quad (23.6)$$

и, соответственно для части, которая описывает взаимодействие

электрона и дырки,

$$H_{эл-д}\Phi = - \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \left\{ W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 \\ L & V \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & L \end{matrix} \right) - W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_1 \\ V & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \\ V & L \end{matrix} \right) \right\} \times \\ \times \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}'}^+ \Phi_V. \quad (23.7)$$

Запишем правую часть уравнения (23.2) в явном виде

$$E\Phi = E \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_1}^+ d_{\mathbf{k}_2}^+ \Phi_V. \quad (23.8)$$

Выражение (23.7) упростим известным образом, перетавив все операторы уничтожения направо и учтя также, что действие на Φ_V как электронных операторов уничтожения, так и дырочных операторов уничтожения дает в результате нуль. Если еще поменять индексы 3, 2, 4 местами, то мы, наконец, получим для (23.7)

$$H_{эл-д}\Phi = - \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} c_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ d_{\mathbf{k}_2}^+ \Phi_V \times \\ \times \left\{ W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_4 \\ L & V \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 \\ V & L \end{matrix} \right) - W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_4 & \mathbf{k}_1 \\ V & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 \\ V & L \end{matrix} \right) \right\}. \quad (23.9)$$

Взглянув на выражения (23.6), (23.8) и (23.9), можно увидеть, что в этих выражениях появились линейные комбинации волновых функций, которые в целом имеют вид (23.3). Но, как мы знаем (см. 13.37)), функции вида (23.3) для различных векторов \mathbf{k} взаимно ортогональны. На этом основании уравнение (23.2), в левой части которого стоят выражения (23.6) и (23.9), а правая часть представлена выражением (23.8), может быть удовлетворено только тогда, когда равны между собой коэффициенты функций (23.3). Сравнивая коэффициенты, сразу получаем систему уравнений для коэффициентов $c_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}$:

$$c_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_V} + \text{const} \right) - \\ - \sum_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} c_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \left\{ W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_4 \\ L & V \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 \\ V & L \end{matrix} \right) - W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_4 & \mathbf{k}_1 \\ V & L \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 \\ V & L \end{matrix} \right) \right\} = E c_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}. \quad (23.10)$$

Ниже будет показано, что эта система уравнений полностью эквивалентна обычному двухчастичному уравнению Шредингера, причем между обеими частицами существует кулоновское взаимодействие. Для этого упростим матричный элемент W , который определяется выражением

$$W \left(\begin{matrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_4 \\ L & V \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 \\ V & L \end{matrix} \right) = \\ = \iint \Phi_{\mathbf{k}_1, L}^*(\mathbf{x}) \Phi_{\mathbf{k}_2, V}^*(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \Phi_{\mathbf{k}_3, V}(\mathbf{x}') \Phi_{\mathbf{k}_4, L}(\mathbf{x}) d^3x d^3x', \quad (23.11)$$

использовав для волновых функций в зонах явный вид блоховской волны

$$\varphi_{\mathbf{k},j}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{\mathbf{k},j}(\mathbf{x}). \quad (23.12)$$

Затем разложим функции u , которые зависят как от \mathbf{x} , так и от \mathbf{k} , в ряд Тейлора по \mathbf{k} . Тем самым мы уже делаем предположение, что важны только те матричные элементы, для которых значения \mathbf{k} малы. После этого получаем формулу

$$\begin{aligned} W \begin{pmatrix} \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_4 \\ L & V \end{pmatrix} \begin{vmatrix} \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 \\ V & L \end{vmatrix} &\approx \\ &\approx \iint e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}_4\mathbf{x}'} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}_3\mathbf{x}'} \{ |u_{0,L}(\mathbf{x})|^2 |u_{0,V}(\mathbf{x}')|^2 + \\ &+ \mathbf{k}_1 (\nabla_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_1,L}^*(\mathbf{x}))_{\mathbf{k}_1=0} u_{0,L}(\mathbf{x}) |u_{0,V}(\mathbf{x}')|^2 + \dots \} d^3x d^3x'. \end{aligned} \quad (23.13)$$

В качестве следующего шага сделаем предположение, что играющие заметную роль значения \mathbf{k} настолько малы, что из всего ряда Тейлора нужно сохранить лишь самый первый член. Мы оставляем, таким образом, в фигурных скобках в (23.13) только член $|u_{0,L}(\mathbf{x})|^2 |u_{0,V}(\mathbf{x}')|^2$. Эта функция периодична с периодом решетки, однако внутри элементарной ячейки она может быстро осциллировать. Поскольку мы приняли, что важны только малые значения \mathbf{k} (т. е. $|\mathbf{k}| \ll \pi/l_0$, где l_0 — постоянная решетки), то экспоненциальные функции в (23.13) внутри каждой элементарной ячейки можно считать практически постоянными. Поэтому выражение (23.13) можно вычислить, усреднив его по отдельным элементарным ячейкам. Поскольку блоховские функции должны быть нормированы в объеме V на 1, то при этом усреднении проявляется множитель $1/V^2$. После этого вместо (23.13) получаем следующее выражение:

$$W \approx \frac{1}{V^2} \iint e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{x} - i(-\mathbf{k}_4)\mathbf{x}'} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{x} + i(-\mathbf{k}_3)\mathbf{x}'} d^3x d^3x'. \quad (23.14)$$

Пренебрежем, наконец, в уравнении (23.10) еще вторым членом в фигурных скобках, который описывает кулоновское обменное взаимодействие и который, как можно подробно показать, для малых значений \mathbf{k} , т. е. при достаточно больших расстояниях между электроном и электронной дыркой, быстро стремится к нулю. Мы утверждаем теперь, что система уравнений (23.10) с упрощением (23.14) и при пренебрежении кулоновским обменным взаимодействием совершенно эквивалентна следующему двухчастичному уравнению Шредингера:

$$\left(\text{const} - \frac{\hbar^2}{2m_L} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_V} \Delta_2 - \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \right) \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \quad (23.15)$$

Для доказательства этого утверждения представим волновую функцию $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ в виде

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 - i\mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2} \quad (23.16)$$

и выведем из (23.10) (с указанным упрощением (23.10)) уравнение (23.15) для ψ . Для этого умножим (23.10) на

$$\frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 - i\mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2} \quad (23.17)$$

и просуммируем по $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$. Рассмотрим вначале часть, относящуюся к кинетической энергии:

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 - i\mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2} c_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_V} + \text{const} \right). \quad (23.18)$$

Поскольку $\hbar^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ можно представить в виде

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = -\Delta e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}},$$

то (23.18) переходит в следующее выражение:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_L} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_V} \Delta_2 + \text{const} \right) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 - i\mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2} c_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (23.19)$$

Согласно (23.16) это последнее выражение идентично выражению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_L} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_V} \Delta_2 + \text{const} \right) \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \quad (23.20)$$

Часть, описывающая взаимодействие, после умножения на (23.17) и при использовании (23.14) принимает вид

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{x}_1 - i\mathbf{k}_2 \mathbf{x}_2} \sum_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} c_{\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \frac{1}{V^2} \times \\ \times \int \int e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{x} + i\mathbf{k}_2 \mathbf{x}'} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{i\mathbf{k}_3 \mathbf{x} - i\mathbf{k}_4 \mathbf{x}'} d^3x d^3x'. \quad (23.21)$$

Соберём вместе все экспоненциальные функции, которые содержат \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , и воспользуемся соотношением

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}')} = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}') \quad (\text{функция Дирака}) \quad (23.22)$$

при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2$.

Ввиду появления двух δ -функций оба интегрирования по d^3x и d^3x' пропадают и (23.21) переходит (при $x = x_1$ и $x' = x_2$) в выражение

$$\sum_{k_3, k_4} c_{k_3, k_4} \frac{1}{V} e^{ik_3 x_1 - ik_4 x_2} \frac{e^2}{|x_1 - x_2|}. \quad (23.23)$$

Но это выражение тождественно совпадает с выражением

$$\frac{e^2}{|x_1 - x_2|} \psi(x_1, x_2). \quad (23.24)$$

Если теперь собрать (23.20) и (23.24) вместе, то получится левая часть уравнения (23.15). Поскольку правая часть получается тривиальным образом, то тем самым эквивалентность (23.15) упрощенному уравнению (23.10) доказана.

Это рассмотрение показало, что электрон и электронная дырка ведут себя совершенно так же, как две частицы с противоположными зарядами и некоторыми эффективными массами m_L и m_V . Поскольку между этими двумя частицами существует кулоновское притяжение, то получается *связанное состояние этих двух частиц, обладающее водородоподобным спектром*. Спектры подобного рода были обнаружены и детально объяснены при поглощении света кристаллами Никитиным и другими авторами. На рис. 32 представлен один из подобных спектров.

Следует указать еще на одно важное обстоятельство. В нашем рассмотрении кулоновское взаимодействие появляется без какого-либо дополнительного множителя. С другой стороны, нам известно, что в поляризуемой среде закон Кулона должен быть модифицирован с учетом диэлектрической постоянной. Следовательно, в уравнении

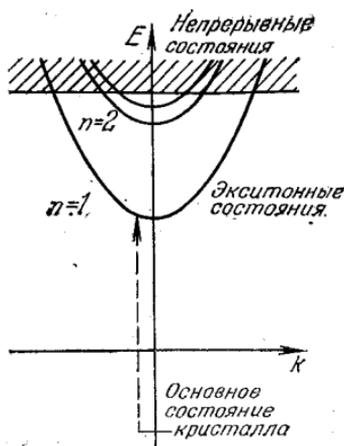


Рис. 32. Энергетическая схема экситона с большим радиусом. На графике представлена полная энергия E всех электронов кристалла как функция полного волнового числа K . В основном состоянии кристалла экситонов нет, а $K = 0$. Если рождается экситон, то его движение раскладывается на движение центра тяжести (а) и относительное движение (б).

(а) Движение центра тяжести определяется полным волновым числом K . Соответствующая энергия $E_{\text{цт}} = \hbar^2 K^2 / 2m_p$, где $m_p = m_V + m_L$ — эффективная масса всего экситона. (б) Относительное движение при больших радиусах, как в случае атома водорода, можно описать квантовыми числами n, l, m . Соответствующая энергия равна $E_{\text{относ}} = -m_r e^4 / (2\hbar^2 e^2 n^2)$ $n = 1, 2, 3, \dots$. Здесь $1/m_r = 1/m_V + 1/m_L$ — приведенная масса экситона. В реальном случае в это выражение следует ввести ряд уточнений. Вертикальная штриховая стрелка представляет оптический переход.

(23.15) нужно феноменологически заменить

$$-\frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \quad \text{на} \quad -\frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}. \quad (23.25)$$

То обстоятельство, что в нашем рассмотрении диэлектрическая постоянная не появилась, связано со слишком сильным упрощением оператора Гамильтона в § 22, где мы пренебрегли виртуальными переходами между зонами.

По существу же эффективная диэлектрическая постоянная может быть последовательно выведена из микроскопической теории в рамках вторичного квантования, к чему мы подойдем несколько ближе в § 25.

Задание к § 23

Как следует изменить (23.15), если учитывается обменное взаимодействие между электроном и электронной дыркой?

§ 24. Экситоны Френкеля

В предыдущих параграфах было принято, что расстояние между электроном и электронной дыркой относительно велико, так что имело смысл разложение полевых операторов $\psi^+(\mathbf{x})$ и $\psi(\mathbf{x})$ по блоховским волнам. В этом параграфе мы рассмотрим обратный предельный случай, который особенно важен для *молекулярных кристаллов*, а именно, когда следует считать, что электрон и электронная дырка находятся на одном и том же атоме. При этом кажется разумным провести разложение не по блоховским функциям, а по атомным волновым функциям или, еще лучше, по функциям Ваннье, которые кратко обсуждались нами в § 19. Соответственно двум имеющимся зонам — валентной и проводимости — введем следующие функции Ваннье:

$$| w_{1,V}(\mathbf{x}) = w_V(\mathbf{x} - \mathbf{l}) \quad (\text{валентная зона } V) \quad (24.1)$$

и

$$| w_{1,L}(\mathbf{x}) = w_L(\mathbf{x} - \mathbf{l}) \quad (\text{зона проводимости } L), \quad (24.2)$$

где \mathbf{l} — радиус-вектор точки локализации частицы. Разложение полевых операторов $\psi(\mathbf{x})$ и $\psi^+(\mathbf{x})$ по этим функциям Ваннье запишем в виде

$$| \psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{l}} a_{1,V} w_V(\mathbf{x} - \mathbf{l}) + \sum_{\mathbf{l}} a_{1,L} w_L(\mathbf{x} - \mathbf{l}), \quad (24.3)$$

$$| \psi^+(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{l}} a_{1,V}^+ w_V^*(\mathbf{x} - \mathbf{l}) + \sum_{\mathbf{l}} a_{1,L}^+ w_L^*(\mathbf{x} - \mathbf{l}). \quad (24.4)$$

Оператор $a_{1,V}^+$ рождает электрон в валентной зоне в точке 1, а оператор a с теми же индексами уничтожает этот электрон. Соответственно оператор $a_{1,L}^+$ создает один электрон в зоне проводимости на атоме 1. Поскольку функции Ванье образуют ортогональную систему, то совершенно аналогично § 13 отсюда следует, что a удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\left\{ \begin{aligned} a_{1,j} a_{1,j'} + a_{1,j'} a_{1,j} &= 0, & a_{1,j}^+ a_{1,j'}^+ + a_{1,j'}^+ a_{1,j}^+ &= 0, \\ a_{1,j} a_{1,j'}^+ + a_{1,j'}^+ a_{1,j} &= \delta_{1,j} \delta_{j,j'}. \end{aligned} \right. \quad (24.5)$$

Индексы j и j' здесь имеют смысл V и L . Точно так же, как и в § 22, нам следует выразить оператор Гамильтона H (22.2) через операторы рождения и уничтожения a^+ , a . Разложим H на два слагаемых:

$$H = H_0 + H_{вз}, \quad (24.6)$$

причем H_0 относится к кинетической энергии электронов в поле заданного атома, а $H_{вз}$ представляет кулоновское взаимодействие между этими электронами. После подстановки разложений (24.3) и (24.4) в (22.2) получаем

$$\begin{aligned} H_0 &= \int \psi^+(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) d^3x = \\ &= \sum_{1,m} a_{1,L}^+ a_{m,L} H_{1,m,L} + \sum_{1,m} a_{1,V}^+ a_{m,V} H_{1,m,V}, \end{aligned} \quad (24.7)$$

где использовано сокращенное обозначение

$$H_{1,m,j} = \int w_j^*(\mathbf{x}-1) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\mathbf{x}) \right\} w_j(\mathbf{x}-m) d^3x, \quad j=L, V. \quad (24.7a)$$

Будем считать, что стоящий в фигурных скобках в (24.7) оператор не приводит к переходам между различными зонами. Преобразуя соответствующим образом выражение

$$H_{вз} = \frac{1}{2} \int \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi^+(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \psi(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}) d^3x d^3x',$$

получим

$$H_{вз} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{1_1, 1_2, 1_3, 1_4 \\ j_1, j_2, j_3, j_4}} a_{1_1, j_1}^+ a_{1_2, j_2}^+ a_{1_3, j_3} a_{1_4, j_4} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1_1 & 1_2 & 1_3 & 1_4 \\ j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \end{pmatrix}, \quad (24.8)$$

где \widehat{W} определяется следующим образом:

$$\left\{ \widehat{W} \begin{pmatrix} 1_1 & 1_2 & 1_3 & 1_4 \\ j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \end{pmatrix} = \int \int w_{j_1}^*(\mathbf{x}-1_1) w_{j_2}^*(\mathbf{x}'-1_2) \times \right. \\ \left. \times \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} w_{j_3}(\mathbf{x}'-1_3) w_{j_4}(\mathbf{x}-1_4) d^3x d^3x'. \right. \quad (24.9)$$

Верхние индексы в \widehat{W} относятся к точке локализации, а нижние — к зоне.

Для дальнейшего упрощения ограничимся случаем, когда можно пренебречь перекрытием волновых функций. Отсюда следует, что $I_4 = I_1 = I$, а также $I_3 = I_2 = I'$.

В последующем рассмотрим такие волновые функции, когда создается только одна электронно-дырочная пара. Это означает, естественно, что электрон не может быть дважды уничтожен в валентной зоне и дважды рожден в зоне проводимости, что приводит к условиям

$$j_3 \neq j_4, j_1 \neq j_2. \quad (24.10)$$

Если использовать эти условия в (24.8), то (24.8) примет вид

$$H_{вз} = \sum_{I, I'} a_{I, V}^+ a_{I', L}^+ a_{I', L} a_{I, V} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & I' & I' & I \\ V & L & L & V \end{pmatrix} + \sum_{I, I'} a_{I, V}^+ a_{I', L}^+ a_{I', V} a_{I, L} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & I' & I' & I \\ V & L & V & L \end{pmatrix}. \quad (24.11)$$

Здесь мы уже воспользовались тем, что пары членов в (24.8) дают одинаковые вклады, так что множитель $1/2$ выпадает. Поскольку предполагается, что валентная зона в отсутствие экситона полностью заполнена и рассматривается только один экситон, то имеет смысл вновь ввести операторы электронной дырки согласно рецепту

$$| \quad a_{I, V} = d_1^+, \quad a_{I', V} = d_1. \quad (24.12)$$

Для упрощения обозначений, начиная с этого места, индекс L у электронов проводимости будет опущен:

$$a_{I, L} = a_1, \quad a_{I', L} = a_1^+. \quad (24.13)$$

Если ввести в (24.11) операторы электронной дырки (24.12), то для операторов в первой строке (24.11) получим

$$a_{I, V}^+ a_{I', L}^+ a_{I', L} a_{I, V} = d_1 a_1^+ a_1 d_1^+, \quad (24.14)$$

или, после перенесения оператора уничтожения d_1 направо,

$$(24.14) = - a_1^+ a_1 d_1^+ d_1 + a_1^+ a_1. \quad (24.14а)$$

Первая строка $H_{вз}$ в (24.11) принимает тогда следующий вид:

$$H_{вз}^{(1)} = - \sum_{I, I'} a_1^+ a_{I'} d_1^+ d_1 \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & I' & I' & I \\ V & L & L & V \end{pmatrix} + \sum_{I'} a_1^+ a_{I'} \sum_I \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & I' & I' & I \\ V & L & L & V \end{pmatrix}. \quad (24.15)$$

В этом выражении вторая сумма содержит только операторы $a_1^+ a_1$ и, следовательно, имеет ту же структуру, что и H_0 в (24.7).

Аналогичным образом поступим с операторами во второй строке (24.11):

$$a_{1,V}^+ a_{1,V}^+, L a_{1,V}^+ a_{1,L} = d_1 a_{1,V}^+ d_1^+ a_1 = a_{1,V}^+ a_1 d_1^+ d_1 - a_{1,V}^+ a_1 \delta_{1,V}. \quad (24.16)$$

Тогда вторая строка $H_{вз}$ в (24.11) принимает следующий вид:

$$H_{вз}^{(2)} = \sum_{1,V} a_{1,V}^+ a_1 d_1^+ d_1 \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1' & 1' & 1 \\ V & L & V & L \end{pmatrix} - \sum_1 a_{1,V}^+ a_1 \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ V & L & V & L \end{pmatrix}. \quad (24.17)$$

Также и здесь вторая сумма содержит только операторы $a_1^+ a_1$, которые стоят в H_0 в (24.7).

Полный оператор Гамильтона $H = H_0 + H_{вз} = H_0 + H_{вз}^{(1)} + H_{вз}^{(2)}$ получается суммированием (24.7), (24.15) и (24.17).

При этом имеет смысл все суммы в (24.7), (24.15) и (24.17), относящиеся к зоне проводимости L , собрать в один эффективный гамильтониан $H_L^{\text{эфф}}$ (поменяв при этом в (24.15) 1 и $1'$ местами):

$$H_L^{\text{эфф}} = \sum_{1,m} a_1^+ a_m H_{1,m,L} + \sum_1 a_1^+ a_1 \times \\ \times \underbrace{\left\{ \sum_{1'} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1' & 1 & 1 & 1' \\ V & L & L & V \end{pmatrix} - \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ V & L & V & L \end{pmatrix} \right\}}_{\Delta E_L}. \quad (24.18)$$

В этом выражении ΔE_L , как можно установить с помощью (24.9), от 1 не зависит, так что ΔE_L для электрона в точке 1 имеет смысл дополнительной постоянной энергии, которая возникает благодаря кулоновскому взаимодействию электрона с заполненной валентной зоной. Поэтому положим

$$H_L^{\text{эфф}} = \sum_{1,m} a_1^+ a_m (H_{1,m,L} + \delta_{1,m} \Delta E_L) \equiv \sum_{1,m} a_1^+ a_m H_{1,m,L}^{\text{эфф}}. \quad (24.19)$$

Перепишем, наконец, электронно-дырочную часть H_0 в (24.7) хорошо известным нам образом:

$$H_d \equiv \sum_{1,m} a_{1,V}^+ a_{m,V} H_{1,m,V} = - \sum_{1,m} d_m^+ d_1 H_{1,m,V} + \underbrace{\sum_1 H_{1,1,V}}_{\Delta E} = \\ = \sum_{1,m} d_1^+ d_m H_{1,m,d} + \Delta E. \quad (24.20)$$

После этих элементарных преобразований полный оператор Гамильтона принимает следующий вид:

$$H = \sum_{1,m} H_{1,m,L}^{\text{эфф}} a_1^+ a_m + \sum_{1,m} H_{1,m,d}^{\text{эфф}} d_1^+ d_m - \\ - \sum_{1,V} a_{1,V}^+ a_1 d_1^+ d_1 \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1' & 1' & 1 \\ V & L & L & V \end{pmatrix} + \sum_{1,V} a_{1,V}^+ a_1 d_1^+ d_1 \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1' & 1' & 1 \\ V & L & V & L \end{pmatrix} + \Delta E. \quad (24.21)$$

Каждый член этого оператора Гамильтона имеет наглядный смысл: в первой сумме с членом $a_1^\dagger a_m$ один электрон в точке m уничтожается, а в точке l вновь рождается. Эта часть H описывает, следовательно, движение отдельного электрона. Совершенно так же вторая сумма в (24.21) представляет движение отдельной электронной дырки. Последняя сумма в (24.21) с операторами

$$a_1^\dagger a_l d_l^\dagger d_1 \equiv a_1^\dagger d_l^\dagger d_1 a_l$$

описывает уничтожение электронно-дырочной пары в точке l и последующее рождение в точке l' , т. е. описывает совместный перенос электрона и электронной дырки. Третий член в (24.21) не описывает никакого переноса: электронная дырка остается в точке l , а электрон — в точке l' . Как можно увидеть, взглянув на определение \hat{W} (24.9), \hat{W} описывает кулоновское взаимодействие между электроном и электронной дыркой в соответствующих точках кристалла.

Действительное движение электрона и электронной дырки осуществляется, естественно, под влиянием всех членов в (24.21), причем относительные величины этих членов определяют, какая из «форм» движения в действительности реализуется.

В случае экситона Френкеля электрон и электронная дырка должны оставаться постоянно в пределах атома или молекулы. Какие члены в H этому благоприятствуют, а какие препятствуют? Оба первых члена в (24.21) служат причиной индивидуального движения отдельных частиц и, следовательно, постоянно грозят разорвать электронно-дырочную пару. Поэтому они являются «вредными». Третий член приводит к притяжению между электроном и электронной дыркой, и поэтому он является благоприятным. Четвертый член, наконец, особенно важен, поскольку он является причиной переноса пары частиц из одной точки кристалла в другую. В предельном случае экситона Френкеля, поэтому, члены в $H^{e\phi\phi}$, для которых $l \neq m$, должны быть достаточно малы. Это требование выполняется довольно хорошо в случае молекулярных кристаллов, так как перекрывание между молекулярными функциями $w_j(x-l)$ незначительно, а именно величина этого перекрывания прямо определяет величину $H^{e\phi\phi}$ для $l \neq m$ (см. задание 1). Хотя в этой ситуации никакого индивидуального движения не может быть, тем не менее электронно-дырочная пара, как мы увидим, движется как целое.

Теперь целесообразно ввести явный вид функции состояния. При этом будем исходить из полностью заполненной валентной зоны, которая описывается функцией состояния Φ_g . В точке l одновременно рождаются электрон и электронная дырка. Ввиду трансляционной симметрии задачи следует провести суммирование по всем точкам локализации l с множителями e^{ikl} . Волновая

функция, таким образом, имеет следующий вид:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}}^+ d_{\mathbf{l}}^+ \Phi_g \quad (24.22)$$

(N равно числу узлов решетки и отвечает за нормировку). Оператор

$$a_{\mathbf{l}}^+ d_{\mathbf{l}}^+ = B_{\mathbf{l}}^+ \quad (24.23a)$$

в (24.22) описывает рождение локализованного в точке \mathbf{l} экситона. Соответствующий (24.22) оператор уничтожения экситона имеет вид

$$d_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}} = B_{\mathbf{l}}. \quad (24.23b)$$

Наша цель состоит в том, чтобы выразить полный гамильтониан (24.21) через операторы $B_{\mathbf{l}}^+$ и $B_{\mathbf{l}}$. Стоящие в последнем члене (24.21) операторы могут быть следующим образом выражены через экситонный оператор $B_{\mathbf{l}}^+$:

$$a_{\mathbf{l}}^+ a_{\mathbf{l}'} d_{\mathbf{l}'}^+ d_{\mathbf{l}} = + (a_{\mathbf{l}'}^+ d_{\mathbf{l}'}^+) (d_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}}) = B_{\mathbf{l}'}^+ B_{\mathbf{l}}, \quad (24.24)$$

так что

$$\sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} a_{\mathbf{l}}^+ a_{\mathbf{l}'} d_{\mathbf{l}'}^+ d_{\mathbf{l}} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1' & 1' & 1 \\ V & L & V & L \end{pmatrix} = \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} B_{\mathbf{l}'}^+ B_{\mathbf{l}} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1' & 1' & 1 \\ V & L & V & L \end{pmatrix}. \quad (24.25)$$

Это выражение описывает уничтожение экситона в точке \mathbf{l} и последующее рождение экситона в точке \mathbf{l}' . Спрашивается теперь, какой вклад дает третий член в (24.21)?

Рассмотрим действие стоящих в нем операторов на локализованное экситонное состояние. Тогда сразу получаем результат

$$a_{\mathbf{l}}^+ a_{\mathbf{l}'} d_{\mathbf{l}'}^+ d_{\mathbf{l}} | a_{\mathbf{m}}^+ d_{\mathbf{m}}^+ \Phi_g \neq 0 \quad (24.26)$$

при $\mathbf{l} = \mathbf{m}$, $\mathbf{l}' = \mathbf{m}$, т. е. $\mathbf{l} = \mathbf{l}'$.

При использовании волновой функции (24.22) из третьего члена (24.21) следует сохранить только те слагаемые, для которых индексы \mathbf{l} и \mathbf{l}' равны:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}}^+ a_{\mathbf{l}} d_{\mathbf{l}}^+ d_{\mathbf{l}} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ V & L & L & V \end{pmatrix} &= \sum_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}}^+ d_{\mathbf{l}}^+ d_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l}} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ V & L & L & V \end{pmatrix} = \\ &= \sum_{\mathbf{l}} B_{\mathbf{l}}^+ B_{\mathbf{l}} \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ V & L & L & V \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (24.27)$$

Выражение (24.27) приводит лишь к изменению энергии локализованного экситонного состояния и не может привести к переходу между различными точками кристалла. Ради полноты рассмотрим два первых члена в (24.21). Действие типичного опера-

торного выражения из первой суммы в (24.21) на локализованное состояние дает следующий результат:

$$a_1^+ a_1 a_m^+ d_m^+ \Phi_g = a_1^+ d_m^+ \Phi_g \delta_{1'm}. \quad (24.28)$$

При $l \neq m$ это означало бы, что возникает состояние совершенно нового типа, а именно такое, в котором электрон удаляется от электронной дырки. Для того чтобы не прийти к противоречию с нашим основным предположением (24.22), мы вновь ограничимся предельным случаем исчезающе малого перекрывания, так что вкладом $H^{\text{эфф}}$ при $l \neq m$ можно пренебречь. Начиная с этого момента, мы рассматриваем только члены с $l = m$ и полагаем

$$H_{1,1,L}^{\text{эфф}} = E_{0,L}. \quad (24.29)$$

В действительности левая часть этого равенства больше не зависит от l , поскольку $H_{1,m,L}^{\text{эфф}}$ зависит только от разности $l - m$. Равным образом, для электронной дырки полагаем

$$H_{1,1,d}^{\text{эфф}} = E_{0,d}. \quad (24.30)$$

Выразим теперь произведение операторов $a_1^+ a_1$ (см. первую сумму в (24.21)) через произведение операторов $B_1^+ B_1$. При этом утверждается, что $a_1^+ a_1$ можно заменить на произведение операторов $B_1^+ B_1$, по крайней мере при использовании функций состояния (24.22):

$$a_1^+ a_1 \rightarrow B_1^+ B_1. \quad (24.31)$$

Утверждение. Соотношение

$$| a_1^+ a_1 \cdot a_m^+ d_m^+ \Phi_g = \delta_{1,m} a_m^+ d_m^+ \Phi_g \quad (24.32)$$

может быть заменено соотношением

$$| B_1^+ B_1 \cdot B_m^+ \Phi_g = \delta_{1,m} B_m^+ \Phi_g. \quad (24.33)$$

Для доказательства нужно лишь подставить в равенство (24.33) определения операторов B_1^+ , B_1 (24.23а) и (24.23б) и воспользоваться перестановочными соотношениями между операторами a :

$$a_1^+ d_1^+ d_1 a_m^+ d_m^+ \Phi_g = \delta_{1,m} a_m^+ d_m^+ \Phi_g. \quad (24.34)$$

(Следует помнить, что $d_1 \Phi_g = 0$, $a_1 \Phi_g = 0$.)

Используя соотношения (24.32) и (24.33), первую сумму в (24.21) можно переписать следующим образом ($l = m$):

$$\sum_l H_{1,1,L}^{\text{эфф}} a_1^+ a_1 = E_{0,L} \sum_l B_1^+ B_1. \quad (24.35)$$

Точно такое же соотношение справедливо и для второй суммы в (24.21). После того как третья и четвертая суммы переписаны

с использованием операторов B_1^+ и B_1 (см. (24.25) и (24.27)), выражение (24.21) окончательно принимает следующий вид:

$$H = \sum_1 B_1^+ B_1 E_{0, \text{общ}} + \sum_{1,1'} B_1^+ B_1 \widehat{W} (1 - I'), \quad (24.36)$$

причем мы положили

$$E_{0, \text{общ}} = E_{0, L} + E_{0, D} - \widehat{W}_0, \quad (24.37)$$

$$\widehat{W}_0 = \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ V & L & L & V \end{pmatrix}, \quad (24.38)$$

$$\widehat{W} (1 - I') = \widehat{W} \begin{pmatrix} 1 & I' & I' & 1 \\ V & L & V & L \end{pmatrix}, \quad (24.39)$$

а постоянную энергию ΔE опустили. С помощью определения \widehat{W} (24.9) легко убедиться, что (24.39) зависит только от $1 - I'$, а (24.38) совсем не зависит от I .

Нельзя не признать аналогию между (24.36) и оператором Гамильтона связанных гармонических осцилляторов. Правда, мы не показали что B^+ , B являются бозе-операторами. Мы вернемся к этому в § 26. Здесь же покажем в заключение, что функция состояния (24.22) является решением соответствующего гамильтониану (24.36) уравнения Шредингера, и определим собственные значения энергии этого уравнения. Для этого подставим функцию состояния (24.22), которая теперь выражена через операторы B_1^+ :

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_1 e^{ik_1} B_1^+ \Phi_g \quad (24.40)$$

в гамильтониан (24.36). Учитывая соотношение (24.33), получаем

$$H\Phi = E_{0, \text{общ}} \Phi + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1'} \sum_1 \widehat{W} (1 - I') B_1^+ e^{ik_1} \Phi_g. \quad (24.41)$$

Второй член преобразуем следующим образом:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1'} e^{ik_1'} B_1^+ \underbrace{\sum_1 \widehat{W} (1 - I') e^{ik(1-I')}}_{W(\mathbf{k})} \Phi_g. \quad (24.42)$$

Очевидно, что выражение (24.42) можно трактовать как произведение исходной волновой функции (24.40) и энергии $W(\mathbf{k})$. Тем самым доказано, что при указанных выше упрощениях волновая функция (24.22) или (24.40) является собственной функцией гамильтона (24.21), причем собственные значения энергии определяются выражением

$$E(\mathbf{k}) = E_{0, \text{полн}} + W(\mathbf{k}). \quad (24.43)$$

Если разложить E по волновому вектору \mathbf{k} , то, как обычно,

получаем

$$E(\mathbf{k}) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (24.44)$$

Сравнение этого результата с (24.43) дает явное выражение для эффективной массы экситона. Из предыдущего изложения следует, что подвижность экситона Френкеля обусловлена исключительно обменным членом $W \begin{pmatrix} I & I' & I' & I \\ V & L & V & L \end{pmatrix}$ (рис. 33). (Этот процесс играет, вообще говоря, значительную роль при переносе энергии органических молекул в растворах и известен как «процесс Фёрстера».) Возбужденные состояния в твердом теле могут

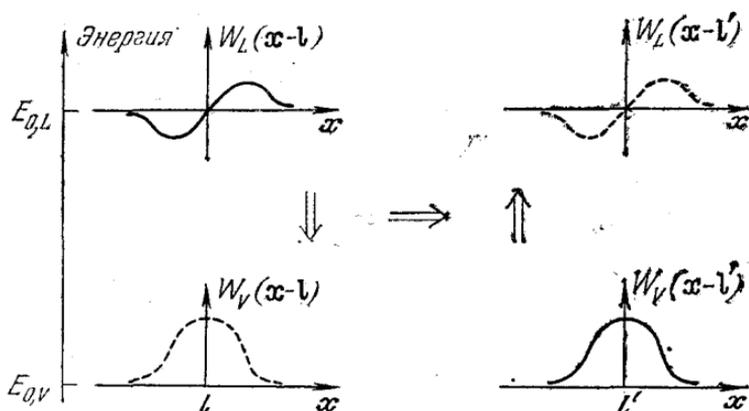


Рис. 33. Механизм распространения экситона Френкеля. Электрон, находящийся на атоме I, переходит из возбужденного состояния в основное и через кулоновское взаимодействие передает свою энергию атому в точке I', который переходит в возбужденное состояние.

распространяться благодаря обменному взаимодействию, хотя эффективная масса электрона и электронной дырки может быть бесконечно большой (это как раз тот случай, когда нет никакого перекрытия между соседними волновыми функциями).

На практике, конечно, могут одновременно присутствовать оба механизма: обменное взаимодействие и перекрытие.

Задания к § 24

1. Почему $H_{l,m,j}$ (24.7а) при $l \neq m$ в случае слабого перекрытия функций Ванье значительно меньше, чем $H_{1,1,j}$?

2. Положить $B_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}l} \hat{B}_{\mathbf{k}}^+$, $B_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}l} \hat{B}_{\mathbf{k}}$ и вывести обратные соотношения $\hat{B}_{\mathbf{k}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}l} B_l^+$, $\hat{B}_{\mathbf{k}} =$

$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}} B_{\mathbf{k}}$. Показать, что оператор Гамильтона (24.36) при этом становится диагональным: $H = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{k}} + \hat{B}_{\mathbf{k}}$.

§ 25. Волны электронной поляризации

На примере экситонов Френкеля объяснение того, каким образом в рамках вторичного квантования можно было бы описать поляризацию электронов кристалла и объяснить возникновение поляризационных волн, оказывается особенно простым. Для того чтобы по возможности наглядно представить наши рассуждения,

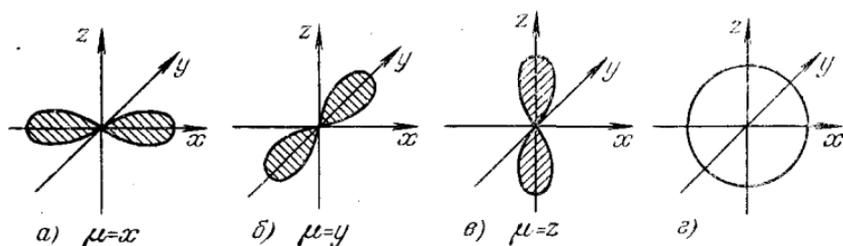


Рис. 34. Схематическое представление распределения заряда функции Ваннье (или атомной функции): а) — в) p -функции зоны проводимости; г) s -функция валентной зоны.

учтем, несколько обобщив результаты § 24, что функции Ваннье $w_V(\mathbf{x}-\mathbf{l})$ валентной зоны должны (подобно атомным s -функциям) описывать сферически симметричное распределение электронного заряда (рис. 34).

В зоне проводимости, напротив, в каждой точке \mathbf{l} , где расположен атом, имеются три волновые функции, распределение заряда которых имеет форму гантели, направленной вдоль одной из осей x , y или z (p -функции) (см. рис. 34).

Будем помечать эти функции Ваннье индексом μ ($= x$ - или y - или z -ориентации) и запишем их в виде $w_{L,\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{l})$. Обозначим индексы V и L , μ одним индексом j :

$$j = \begin{cases} V, \\ L, \mu. \end{cases}$$

Разложим полевые операторы $\psi^+(\mathbf{x})$ и $\psi(\mathbf{x})$ по функциям Ваннье:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{1,j} a_{1,j} w_j(\mathbf{x}-\mathbf{l}), \quad \psi^+(\mathbf{x}) = \sum_{1,j} a_{1,j}^+ w_j^*(\mathbf{x}-\mathbf{l}). \quad (25.1)$$

Эти волновые функции, естественно, теперь должны быть подставлены в оператор Гамильтона (24.6). Следующие затем преобразования проводятся практически так же, как и в предыдущих па-

параграфах, так что можно сразу написать конечный результат: гамильтониан (24.36) следует заменить гамильтонианом

$$H = \sum_{\mathbf{l}, \mu} B_{\mathbf{l}, \mu}^+ B_{\mathbf{l}, \mu} E_{0, \text{общ}} + \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{l}' \\ \mu, \mu'}} B_{\mathbf{l}' \mu'}^+ B_{\mathbf{l}, \mu} \widehat{W}_{\mu' \mu} (1 - I'), \quad (25.2)$$

где

$$\begin{aligned} & \widehat{W}_{\mu' \mu} (1 - I') = \\ & = \int \int w_V^* (\mathbf{x} - \mathbf{l}) w_{L, \mu} (\mathbf{x} - \mathbf{l}) \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} w_{L, \mu'}^* (\mathbf{x}' - \mathbf{l}') w_V (\mathbf{x}' - \mathbf{l}') d^3x d^3x'. \end{aligned}$$

Смысл этого последнего выражения наглядно пояснен на рис. 33. Однако значительно более важно, нежели повторное введение гамильтониана (25.2), для нашего понимания сходства экситонов Френкеля с волнами поляризации, следующее: представим себе ряд точечных зарядов e_i в точках \mathbf{l}_i кристаллической решетки. Выражение для энергии взаимодействия между некоторым дополнительным зарядом и квантованным полем кристаллических электронов имеет следующий вид:

$$\left| \int \psi^+ (\mathbf{x}) \frac{e_i e}{|\mathbf{x} - \mathbf{l}_i|} \psi (\mathbf{x}) d^3x. \quad (25.3) \right.$$

Если в это выражение вместо полевых операторов ψ^+ и ψ подставить разложения (25.1), то (25.3) переходит в

$$\sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}', j, j'} a_{\mathbf{l}, j}^+ a_{\mathbf{l}', j'} \int w_j^* (\mathbf{x} - \mathbf{l}) \frac{e_i e}{|\mathbf{x} - \mathbf{l}_i|} w_{j'} (\mathbf{x} - \mathbf{l}') d^3x. \quad (25.4)$$

Как и в предыдущих параграфах, мы примем, что между волновыми функциями нет никакого перекрывания, так что в сумме (25.4) остаются только члены с $\mathbf{l}' = \mathbf{l}$. Далее, члены, в которых к тому же $j = j'$, для нас неинтересны, поскольку выражения вида $a_{\mathbf{l}, j}^+ a_{\mathbf{l}, j} \int \dots d^3x$ означают лишь постоянный сдвиг энергии, который, таким образом, не связан с электронными переходами. Поэтому далее будут рассмотрены только те вклады в (25.3), для которых $j \neq j'$. В интеграле (25.4), который распространен по всему объему, исключим вначале элементарную ячейку с радиусом-вектором \mathbf{l}_i и разложим $1/|\mathbf{x} - \mathbf{l}_i|$ в ряд по степеням $1/|\mathbf{l} - \mathbf{l}_i|$, причем через \mathbf{l} вновь обозначены фигурирующие в (25.1; 2) радиусы-векторы точек локализации функции Ванье.

Введем сокращенные обозначения

$$\mathbf{x} - \mathbf{l} = \xi, \quad (25.5a)$$

$$\mathbf{l}_i - \mathbf{l} = \mathbf{R}, \quad (25.5b)$$

откуда следует

$$\mathbf{x} - \mathbf{l}_i = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{R}. \quad (25.5\text{в})$$

Для $|\boldsymbol{\xi}| \ll |\mathbf{R}| = R$ справедливо разложение

$$\frac{1}{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{R}|} \approx \frac{1}{R} \left\{ 1 + \frac{\boldsymbol{\xi}\mathbf{R}}{R^2} + \dots \right\}. \quad (25.6)$$

Если подставить это разложение в интеграл (25.4), то получим

$$\int \dots d^3x = \frac{e_i e}{|1_i - 1|} \int \underbrace{w_j^*(\boldsymbol{\xi}) w_{j'}(\boldsymbol{\xi})}_{=0 \text{ при } j \neq j'} d^3\xi + \\ + e_i \frac{1_i - 1}{|1_i - 1|^3} \int \underbrace{w_j^*(\boldsymbol{\xi}) e \boldsymbol{\xi} w_{j'}(\boldsymbol{\xi})}_{\mathbf{D}_{jj'}} d^3\xi. \quad (25.7)$$

Первый интеграл в правой части (25.7) исчезает ввиду ортогональности функций Ванье, принадлежащих разным зонам. Второй интеграл обозначим, как указано, через $\mathbf{D}_{jj'}$. Можно показать (что, однако, относится к атомной физике), что $\mathbf{D}_{jj'} = 0$, если оба индекса j и j' относятся либо к s -функциям, либо к p -функциям. Для нас это означает следующее: $\mathbf{D}_{jj'} \neq 0$ по меньшей мере тогда, когда j является индексом валентной зоны, а j' — зоны проводимости или наоборот. Вместо стоящих в (25.4) произведений операторов $a_{1,j}^+ a_{1,j'}$ вновь введем с помощью операторов электронных дырок d_1 операторы рождения и уничтожения локализованных экситонов, используя следующую схему:

для

$$\left| \begin{array}{l} j = L, \mu, \\ j' = V \end{array} \right. \quad a_{1,j}^+ a_{1,j'} \text{ заменяется на } a_{1,\mu}^+ d_1^+ = B_{1,\mu}^+, \quad (25.8\text{а})$$

для

$$\left| \begin{array}{l} j = V, \\ j' = L, \mu \end{array} \right. \quad a_{1,j}^+ a_{1,j'} \text{ заменяется на } d_1 a_{1,\mu} = B_{1,\mu}. \quad (25.8\text{б})$$

Далее запишем дипольный матричный элемент \mathbf{D} в несколько упрощенном виде, а именно:

для

$$\left| \begin{array}{l} j = L, \mu, \\ j' = V \end{array} \right. \quad \mathbf{D}_{jj'} = \mathbf{D}_\mu$$

и для

$$\left| \begin{array}{l} j = V, \\ j' = L, \mu \end{array} \right. \quad \mathbf{D}_{jj'} = \mathbf{D}_\mu^*. \quad (25.9)$$

Ввиду s - и p -симметрии функций Ванье нашего примера можно

показать (чего мы, однако, не будем делать), что при $\mu = x, y, z$

$$\mathbf{D}_x = (D, 0, 0) = D\mathbf{e}_x,$$

$$\mathbf{D}_y = (0, D, 0) = D\mathbf{e}_y, \quad \mathbf{e}_\mu - \text{единичный вектор.}$$

$$\mathbf{D}_z = (0, 0, D) = D\mathbf{e}_z,$$

Индексу μ , таким образом, соответствует дипольный момент D в направлении μ ($\mu = x, y, z$).

Если после всех этих рассуждений и преобразований подставить (25.7) в (25.4), то сразу получим следующий результат:

$$\left| \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) \frac{e_i e}{|\mathbf{x} - \mathbf{l}_i|} \psi(\mathbf{x}) d^3x = \sum_{\mathbf{l}, \mu} B_{\mathbf{l}, \mu}^+ e_i \frac{(l_i - 1)}{|l_i - 1|^3} \mathbf{D}_\mu + \sum_{\mathbf{l}, \mu} B_{\mathbf{l}, \mu} e_i \frac{(l_i - 1)}{|l_i - 1|^3} \mathbf{D}_\mu^* \right. \quad (25.10)$$

Правая часть (25.10) имеет весьма наглядный смысл. Например, выражение $e_i \frac{(l_i - 1)}{|l_i - 1|^3} (\mathbf{D}_\mu B_{\mathbf{l}, \mu}^+)$ с классической точки зрения представляет энергию взаимодействия заряда e_i в точке \mathbf{l}_i и диполя в точке \mathbf{l} с дипольным моментом $\mathbf{P} = \mathbf{D}_\mu B_{\mathbf{l}, \mu}^+ = D\mathbf{e}_\mu B_{\mathbf{l}, \mu}^+$. Дипольный момент \mathbf{P} , таким образом, равен произведению максимально достижимого дипольного момента D , единичного вектора в направлении μ и зависящей от точки \mathbf{l} амплитуды $B_{\mathbf{l}, \mu}^+$. Указанную величину \mathbf{P} следует трактовать как амплитуду поляризационных колебаний электронов кристалла. Выражение (25.10) нужно, естественно, прибавить к оператору Гамильтона (25.2). Для того чтобы не перегружать наше рассмотрение излишними подробностями, обратимся к обсуждению простого специального случая, когда экситон Френкеля покоится, и опустим вторую сумму в (25.2). В этом случае уравнение Шредингера, описывающее взаимодействие электронов кристалла с точечным зарядом e_i , имеет с учетом (25.2) и (25.10) следующий вид ($E_{0, \text{общ}} = E_0$):

$$\left\{ \sum_{\mathbf{l}, \mu} \left(E_0 B_{\mathbf{l}, \mu}^+ B_{\mathbf{l}, \mu} + B_{\mathbf{l}, \mu}^+ \underbrace{\sum_i e_i \frac{(l_i - 1)}{|l_i - 1|^3} \mathbf{D}_\mu}_{\gamma_{\mathbf{l}, \mu}} + B_{\mathbf{l}, \mu} \underbrace{\sum_i e_i \frac{(l_i - 1)}{|l_i - 1|^3} \mathbf{D}_\mu^*}_{\gamma_{\mathbf{l}, \mu}^*} \right) \right\} \Phi = E\Phi \quad (25.11)$$

и представляет не что иное, как квантованные поляризационные колебания электронов кристалла, которые взаимодействуют с закрепленными зарядами.

Операторы $B_{1,\mu}^+$ и $B_{1,\mu}$, как будет показано в § 26, приближенно (только приближенно!) можно рассматривать как бозе-операторы. В этом случае проблема (25.11) становится для нас совсем привычной, поскольку в ней по существу речь идет о совокупности смещенных осцилляторов. Энергия основного состояния при этом дается выражением (см. § 6)

$$E = - \sum_{1,\mu} \frac{1}{E_0} |\gamma_{1,\mu}|^2, \quad (25.12)$$

где γ — введенные в (25.11) сокращения.

Для того чтобы поближе познакомиться с физическим содержанием результата (25.12), в него следует подставить явный вид γ , при этом ради простоты мы ограничимся случаем двух точечных зарядов $i=1, 2$. Тогда выражение для энергии принимает следующий вид:

$$E = - \frac{1}{E_0} \sum_{1,\mu} e_1^2 \underbrace{\frac{|(1_1-1) D_\mu|^2}{|1_1-1|^6}}_{\sim e_1^2} - \underbrace{\{1 \rightarrow 2\}}_{\sim e_2^2} - \underbrace{\frac{1}{E_0} \sum_{1,\mu} e_1 e_2 \frac{(1_1-1) D_\mu \cdot (1_2-1) D_\mu^*}{|1_1-1|^3 |1_2-1|^3}}_{\sim e_1 e_2} + \text{к. с.} \quad (25.13)$$

Оба выражения в первой строке (25.13) отрицательны и пропорциональны квадрату величины заряда e_i ; это означает, что внесение в кристалл заряда приводит к уменьшению *собственной энергии частицы*. Понятие собственной энергии играет в квантово-полевой теории и в особенности в физике элементарных частиц основополагающую роль. Эту энергию можно представить себе совершенно наглядно. Введенный в кристалл заряд смещает благодаря кулоновскому взаимодействию электроны кристалла из положений равновесия, т. е. поляризует их. Это смещение центров тяжести в нашем примере можно представить в виде суперпозиции s - и p -функций. В рамках вторичного квантования это означает, что электрон из основного состояния, в нашей модели из s -состояния, частично удаляется и с определенной вероятностью переводится в возбужденное, в нашей модели p -состояние (рис. 35). Математически это выражается присутствием операторов рождения и уничтожения B^+ и B в (25.11). Поляризованные таким образом электроны со своей стороны создают поле, которое действует обратно на введенный заряд, что и приводит к изменению его собственной энергии.

Вычислим теперь выражение во второй строке (25.13). Оно пропорционально произведению e_1 и e_2 и представляет, следовательно, *дополнительное прямое взаимодействие между обоими точечными зарядами*. Положим для краткости

$$l_1 - l_2 = \mathfrak{L} \quad (25.14)$$

и учтем, что в нашей модели D_μ является вектором, три компоненты которого вдоль направлений x , y и z одинаковы по вели-

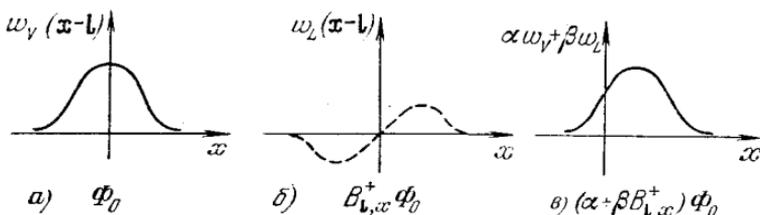


Рис. 35. Наглядное представление функций состояния «смещенного осциллятора»

$$\Phi = \alpha \exp(\gamma B_{1,x}^+) \Phi_0 \equiv \alpha \Phi_0 + \beta B_{1,x}^+ \Phi_0, \quad \beta = \alpha \gamma.$$

а) Основному состоянию Φ_0 отвечают занятые состояния в валентной зоне, которые представлены функциями s -типа. б) Под действием $B_{1,x}^+ = a_{1,L}^+ a_{1,V}$ электрон в состоянии V уничтожается и рождается в состоянии L , $\mu = x$. в) Электрон находится в состоянии, которое описывается комбинацией V - и L -функций. Его центр тяжести зарядового распределения смещен, т. е. атом поляризован.

чине. Тогда для второй строки (25.13), которая представляет энергию взаимодействия между зарядами и которую мы поэтому кратко обозначим через $E_{вз}$, получаем следующий результат:

$$E_{вз} = -e_1 e_2 \frac{2|D|^2}{E_0} \sum_{\mathbf{l}} \frac{l_x(l_x - \mathcal{L}_x) + l_y(l_y - \mathcal{L}_y) + l_z(l_z - \mathcal{L}_z)}{|\mathbf{l}|^3 |1 - \mathfrak{L}|^3}. \quad (25.15)$$

При этом, используя (25.14), мы изменили индекс суммирования \mathbf{l} . Вычисление сумм в (25.15) зависит, естественно, от кристаллической структуры, которая определяет векторы положения \mathbf{l} , и довольно утомительно. Поскольку нас интересует только принципиальная сторона дела, перейдем сразу к непрерывному распределению зарядов. Заменим сумму в (25.15) на интеграл (положив $\mathbf{l} \rightarrow \mathbf{x}$). Вычисление, если вспомнить электростатику, оказывается элементарным. Как показано там, имеет место результат

$$\int \frac{\mathbf{x}(\mathbf{x} - \mathfrak{L})}{|\mathbf{x}|^3 |\mathbf{x} - \mathfrak{L}|^3} d^3x = 4\pi \frac{1}{|\mathfrak{L}|}. \quad (25.16)$$

С учетом этого результата (*дополнительная*) энергия взаимодействия между двумя зарядами (25.15) принимает очень прос-

той вид

$$\left| E_{вз} = - e_1 e_2 \frac{1}{|l_1 - l_2|} \text{const}, \right. \quad (25.17)$$

где константа дается выражением

$$\text{const} = \frac{8\pi |D|^2}{E_0 v}; \quad (25.18)$$

здесь v — объем элементарной ячейки. Дополнительная энергия (25.17), которая добавляется к энергии взаимодействия согласно закону Кулона в вакууме, может быть очень легко интерпретирована с макроскопической точки зрения. Полная энергия взаимодействия складывается из энергии кулоновского взаимодействия в вакууме $e_1 e_2 / |l_1 - l_2|$ и дополнительной энергии (25.17):

$$\left| E_{вз, \text{полн}} = \frac{e_1 e_2}{|l_1 - l_2|} - \frac{e_1 e_2}{|l_1 - l_2|} \text{const} = \frac{e_1 e_2}{\varepsilon |l_1 - l_2|}. \right. \quad (25.19)$$

В последнем равенстве этого выражения введена диэлектрическая постоянная $\varepsilon = \frac{1}{1 - \frac{8\pi |D|^2}{E_0 v}}$, которая постоянно встречается

в феноменологической теории. Из сравнения левой и правой частей можно прямо определить ε через атомные величины. Тем самым мы получаем микроскопическую квантовую теорию поляризации кристалла, а именно — электронов кристалла.

Настоящая формулировка с помощью вторичного квантования допускает ряд очевидных обобщений. Так, в § 24 мы видели, что экситоны Френкеля, вообще говоря, движутся. Поэтому первую сумму в (25.11) в общем случае следует заменить оператором Гамильтона (25.2), так что теперь возникает связь между операторами $B_{l,\mu}^+$ и $B_{l',\mu}$ с различными индексами l и l' . Чтобы устранить этот недостаток, нам следует вместо локализованных экситонных операторов ввести такие, которые относятся к бегущим волнам, как это было сделано в задании 2 к § 24. Затем, внедренные заряды e_i , как правило, не являются бесконечно тяжелыми. К проблеме подвижных внедренных зарядов, взаимодействующих с квантованным бозевским полем, мы вернемся обстоятельно в §§ 35, 36. Оба эти обобщения имеют своим следствием изменение кулоновского закона (25.19) на малых расстояниях. За подробностями мы отсылаем к специальной литературе.

Задания к § 25

1. По аналогии с § 24 вывести (25.2).

2. Показать, что при подстановке плоских продольных и поперечных поляризационных волн H (25.2) (аналогично заданию 2 к § 24) диагонализуются.

3. Перейти в $H_{\text{общ}} = (25.2) + (25.10)$ к бегущим поляризационным волнам экситонов Френкеля и преобразовать H .

4. Обосновать интерпретацию рис. 35.

а) Почему справедлива указанная там формула?

б) Вычислить к этому $\langle \Phi | \int \varphi^+(x) e x \varphi(x) d^3x | \Phi \rangle$, используя для Φ а), б), в), а для $\varphi^+(x)\varphi(x) - (25.1)$.

§ 26. Экситонная материя

В этом параграфе мы хотим обратить внимание читателя на совершенно новую область исследований в физике твердого тела. При этом мы укажем лишь на некоторые важные моменты. Однако изложенные в нашей книге математические методы вполне достаточны, чтобы полностью рассмотреть упоминаемые ниже задачи, так что читатель будет сразу в состоянии следить за оригинальной литературой.

Благодаря высокой интенсивности лазерных источников стало возможным создать в кристалле высокую плотность экситонов. Тем самым открывается чрезвычайно привлекательная возможность создания в некотором смысле искусственной материи. Каждый экситон представляет собой своего рода водородоподобное образование, причем благодаря различию кристаллов эффективные массы электрона, электронной дырки и величины диэлектрической постоянной в законе Кулона могут оказаться совершенно различными. При высоких плотностях экситонной материи проявляются такие явления, которые частично известны и для обычной материи. Прежде всего, экситоны, как впервые экспериментально убедительно показал Никитин с сотрудниками, могут образовывать экситонные молекулы. Поскольку экситоны часто можно считать бозе-частицами, было предположено, что при высоких плотностях может иметь место бозе-эйнштейновская конденсация, совершенно аналогично сверхтекучему гелию. Здесь все же следует указать, что экситоны ни в коем случае не являются в точном смысле этого слова бозе-частицами. Это можно увидеть с помощью небольшого расчета, который мы проведем на примере экситонов Френкеля. Если исходить из операторов локализованного в узле l' (или l) решетки экситона, то, как мы видели в § 24, бегущие экситонные волны конструируются следующим образом:

$$\hat{B}_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l'} e^{-i\mathbf{k} \cdot l'} B_{l'}^{\pm}, \quad B_{l'}^{\pm} = a_1^{\pm} d_1^{\pm},$$

$$\hat{B}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k} \cdot l} B_l, \quad B_l = d_1 a_1. \quad (26.1)$$

Бозевский характер экситона был бы установлен, если бы операторы рождения и уничтожения удовлетворяли обычным пере-

становочным соотношениям. Для этого образуем коммутатор из \widehat{B}_k и \widehat{B}_k^+ , применив (26.1):

$$[\widehat{B}_k, \widehat{B}_k^+] = \frac{1}{N} \sum_{1,1'} e^{ik1 - ik'1'} [d_1 a_1, a_1^+ d_1^+]. \quad (26.2)$$

Коммутатор под знаком суммы, содержащий электроны и электронные дырки, принимает вид

$$[d_1 a_1, a_1^+ d_1^+] = \delta_{11'} (1 - a_1^+ a_1 - d_1^+ d_1). \quad (26.3)$$

Если подставить это выражение в (26.2) и использовать ортогональность плоских волн, то получим

$$[\widehat{B}_k, \widehat{B}_k^+] = \delta_{kk'} - \frac{1}{N} \sum_1 e^{i(k-k')1} (a_1^+ a_1 + d_1^+ d_1). \quad (26.4)$$

Если бы в правой части (26.4) стоял только символ Кронекера, то бозевские перестановочные соотношения были бы действительно выполнены. Дополнительный член зависит, очевидно, от числа электронов и электронных дырок, поскольку он содержит операторы числа частиц. Совершенно ясно, что этим членом можно пренебрегать до тех пор, пока соответствующие функции состояния содержат лишь незначительное число экситонов n , т. е. когда $n \ll N$. При рассмотрении более высоких плотностей экситонов необходимо обращать внимание на это нарушение бозевских перестановочных соотношений.

Согласно теории Келдыша и Козлова и Ханамуры при определенных обстоятельствах и в этом случае можно прийти к конденсации Бозе — Эйнштейна. Мы не приводим вычислений этих авторов, указывая лишь читателю, что математический метод совершенно аналогичен методу теории сверхпроводимости, который будет обсуждаться в § 42.

По предположению Келдыша возможно также, что экситоны образуют своего рода металлические капельки. При этом плотность становится настолько большой, что отдельные электроны могут быть удалены от своих электронных дырок. Однако капельки не распадаются, за что ответственно, как показал Андерсон с сотрудниками, кулоновское обменное взаимодействие. Как мы уже видели в рамках приближения Хартри — Фока, наряду с обычным членом, описывающим кулоновское взаимодействие, имеется еще только что упомянутый член обменного взаимодействия, знак которого противоположен знаку члена собственно кулоновского взаимодействия, что может приводить к некоторому притяжению между частицами с одинаковыми по знаку зарядами.

Кажется, что существование этих капелек на самом деле обнаружено рядом авторов, в частности Бенуа а Ла Гийомом.

§ 27. Плазмоны

а) **Классическое рассмотрение.** Под плазмонами мы понимаем кванты плазменных колебаний. Прежде всего вспомним, что вообще значит плазма и ее колебания. Если очень сильно нагреть газ, то атомы частично или полностью ионизируются. Тогда электроны оказываются довольно подвижными относительно ионов и ядер. Система такого рода, состоящая из противоположно заряженных и подвижных частиц, называется плазмой.

Покажем вначале на примере классических частиц, что плазма такого рода может испытывать колебания. Ради простоты будем рассматривать положительно заряженные тяжелые частицы как однородный и неподвижный фон и рассмотрим движение легких отрицательно заряженных частиц — электронов. Будем считать, что зарядовая плотность ρ этих частиц является непрерывной функцией координат, и разложим ее по плоским волнам:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}(t) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{V}}. \quad (27.1)$$

Одна из таких волн представлена на рис. 9. Разложения такого рода уже встречались нам ранее, например, при рассмотрении колебаний решетки. Уже там было ясно, что для колебаний является типичным наличие гармонической зависимости амплитуд от времени:

$$\rho_{\mathbf{q}}(t) = e^{i\Omega_{\mathbf{q}}t} \rho_{\mathbf{q}}(0). \quad (27.2)$$

С помощью простых соотношений классической электродинамики можно получить уравнение для подобных колебаний плотности и вычислить соответствующую плазменную частоту Ω .

Для этого рассмотрим элемент объема ΔV , в котором находятся ΔN электронов, различаемых индексом i . Пространственные координаты электронов обозначим через $\mathbf{x}_i(t)$, а их скорости — через $\mathbf{v}_i(t)$. Тогда каждый электрон под действием поля \mathbf{E} (в соответствующей точке пространства \mathbf{x}_i) будет ускоряться согласно уравнению

$$m \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = -e\mathbf{E}(\mathbf{x}_i).$$

Усредним это уравнение по выделенному элементу объема:

$$m \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\Delta V} \sum_i \mathbf{v}_i = e \frac{1}{\Delta V} \sum_i \mathbf{E}(\mathbf{x}_i). \quad (27.3)$$

С помощью следующего соотношения введем среднюю плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{x})$: $\mathbf{j}(\mathbf{x}) = e \frac{1}{\Delta V} \sum_i \mathbf{v}_i$, а среднюю напряженность поля $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ с

помощью соотношения $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Delta N} \sum_i \mathbf{E}(\mathbf{x}_i)$. Тогда уравнение (27.3) примет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{e^2}{m} \frac{\Delta N}{\Delta V} \mathbf{E}(\mathbf{x}). \quad (27.4)$$

Применим к обеим частям этого уравнения операцию дивергенции и учтем, что согласно классической электродинамике справедливы соотношения

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho,$$

где ρ — плотность заряда. Тогда (27.4) переходит в ¹⁾

$$\frac{\partial^2 \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{m} \frac{\Delta N}{\Delta V} e^2 \rho(\mathbf{x}, t). \quad (27.5)$$

Но это уравнение есть в точности уравнение колебаний $\partial^2 \rho / \partial t^2 + \Omega_{\Pi}^2 \rho = 0$ с плазменной частотой

$$\Omega_{\Pi} = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}}, \quad (27.6)$$

где $n = \Delta N / \Delta V$ — средняя плотность частиц. Все волны имеют одну и ту же плазменную частоту Ω_{Π} .

б) Квантовомеханическое рассмотрение. Метод Эренрейха — Коэна. Поскольку твердое тело представляет собой существенно иной объект, нежели ионизированный газ, то поначалу может показаться странным, что мы проводим параллель с плазмой. Однако только что мы видели, что для плазмы необходимо лишь, чтобы заряды одного типа легко смещались относительно зарядов другого типа. Из теории Блоха нам известно (см. §§ 17, 20), что электроны в твердом теле в действительности ведут себя практически как свободные частицы. Это и является предпосылкой для возникновения плазмы твердого тела. Тем не менее в случае твердого тела следует сделать некоторые существенные оговорки.

1. Электроны следует рассматривать в рамках квантовой теории.

2. Электроны подчиняются статистике Ферми.

Таким образом, следует развить теорию, в которой отражены оба эти момента. Для этого нам вновь лучше всего опереться на формализм вторичного квантования и подумать, как можно было бы перенести классический подход на случай квантовомеханического рассмотрения. При этом в основу рассмотрения будет

¹⁾ Мы не проводим различия между непрерывным и дискретным рассмотрением, поскольку здесь это не имеет значения.

положено представление Гейзенберга (ср. § 16). Объектом нашего исследования и здесь является электронная плотность, которая известным образом может быть сделана оператором:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi^+(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t). \quad (27.7)$$

Заряд электрона в (27.7) ради простоты опущен, поскольку при определенных обстоятельствах колебания зарядовой плотности можно идентифицировать с колебаниями плотности.

Теперь следует показать, что фурье-компоненты (27.7) действительно зависят от времени так, как это указано в (27.2). Для этого разложим зарядовую плотность (27.7) в ряд Фурье. Соответствующие компоненты Фурье даются выражением

$$\rho_{\mathbf{q}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int \psi^+(\mathbf{x}, t)\psi(\mathbf{x}, t)e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} d^3x. \quad (27.8)$$

Это выражение можно преобразовать дальше, если разложить операторы рождения и уничтожения $\psi^+(\mathbf{x})$, $\psi(\mathbf{x})$ по плоским волнам, которые нормированы в объеме V :

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad (27.9)$$

$$\psi^+(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \quad (27.10)$$

Если теперь подставить (27.9) и (27.10) в (27.8), то после кратких промежуточных вычислений получим выражение

$$\rho_{\mathbf{q}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(t) a_{\mathbf{k}}(t), \quad (27.11)$$

где $\rho_{\mathbf{q}}(t)$ является, естественно, оператором, поскольку $a_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}^+$ — операторы. Чтобы получить классические амплитуды, нам следует перейти, как обычно в квантовой теории, к средним значениям вида

$$\overline{\rho_{\mathbf{q}}(t)} = \langle \Phi | \rho_{\mathbf{q}} | \Phi \rangle. \quad (27.12)$$

Теперь наша задача состоит в том, чтобы получить уравнение движения для (27.11) и (27.12). Мы сделаем это, предварительно введя уравнение движения для произведения операторов

$$a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(t) a_{\mathbf{k}}(t). \quad (27.13)$$

Эти операторы, как можно видеть из выражений (27.7) и (27.11), зависят от времени. Как уже было отмечено, рассмотрение проводится в представлении Гейзенберга (§ 16). Для того чтобы ввести уравнение движения для оператора в представлении Гейзенберга, воспользуемся рецептами § 16. Уравнение движения неко-

того оператора Ω в общем случае имеет вид

$$-i\hbar\dot{\Omega} = [H, \Omega], \quad (27.14)$$

где H — гамильтониан системы. Здесь мы рассматриваем оператор Гамильтона, который описывает взаимодействие между электронами. Потенциал решетки учитывается нами с помощью метода эффективной массы, так что в основу рассмотрения кладется предположение о положительно заряженном непрерывном фоне. Таким образом, оператор Гамильтона имеет вид

$$H = \int \psi^\dagger(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right\} \psi(\mathbf{x}) d^3x + \\ + \frac{1}{2} \int \psi^\dagger(\mathbf{x}') \psi^\dagger(\mathbf{x}) \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}') d^3x d^3x'. \quad (27.15)$$

Этот оператор Гамильтона построен с помощью операторов $\psi^\dagger(\mathbf{x})$ и $\psi(\mathbf{x})$. Поскольку, однако, мы ищем уравнение движения для (27.13), то подставим прежде всего известным нам образом (см. § 20) выражения (27.9) и (27.10) в (27.15) и после небольших преобразований получим

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} W(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4) a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4}. \quad (27.16)$$

Здесь W дается выражением

$$W(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4) = \\ = \frac{1}{V^2} \iint e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{x}' - i\mathbf{k}_2 \mathbf{x}} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{i\mathbf{k}_3 \mathbf{x} + i\mathbf{k}_4 \mathbf{x}'} d^3x d^3x'. \quad (27.17)$$

Двойной интеграл Фурье (27.17) по кулоновскому взаимодействию может быть легко вычислен в явном виде, чего, однако, мы не будем здесь делать, так как это не является задачей квантовой теории. В конце концов получается следующий результат: (27.17) принимает вид

$$W = \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) v_{\mathbf{q}}, \quad (27.18)$$

причем $v_{\mathbf{q}}$ определяется выражением

$$v_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2 V}, \quad \text{где } \mathbf{q} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4). \quad (27.19)$$

В выражении (27.16) значение $\mathbf{q} = 0$ следует исключить, так как предполагается, что отрицательный электронный заряд полностью компенсируется положительным фоном. Применяв соотношение (27.14) и используя для гамильтониана выражение (27.16), получим уравнение движения для оператора (27.13). Затем следует вычислить коммутаторы между одной парой операторов и другой

парой или четверкой операторов, т. е., например, выражения вида

$$[a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'}]. \quad (27.20)$$

Эти коммутаторы вычисляются в упражнении 4 к § 16.

После небольших преобразований получаем уравнение движения

$$i\hbar \frac{d}{dt} (a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}) = (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) (a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}) + \\ + \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} \{ (a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'}) (a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}'}) - (a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}'}) (a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}}) \}. \quad (27.21)$$

Дальнейшему рассмотрению (27.21) существенно поможет обращение к методу Эренрейха и Коэна. Поскольку мы все равно ищем уравнения движения для средних значений вида (27.12), то само собой напрашивается образовать средние значения в обеих частях (27.21) относительно функций состояния Φ . Тогда сразу будет видно, что слева появляются средние значения, содержащие два оператора, а справа, напротив, — четыре оператора. Тем самым получается последовательность иерархически связанных уравнений. Но эта последовательность, если обратиться к основам метода Хартри, может быть оборвана.

Как было отмечено в задании к § 20, в методе Хартри среднее значение от четырех произвольных операторов можно разложить на произведение двух средних значений, каждое из которых содержит по два оператора. С помощью очевидного видоизменения этого правила полагаем

$$\langle \Phi | \psi^+(y') \psi(y) \psi^+(x') \psi(x) | \Phi \rangle \simeq \\ \simeq \langle \Phi | \psi^+(y') \psi(y) | \Phi \rangle \langle \Phi | \psi^+(x') \psi(x) | \Phi \rangle. \quad (27.22)$$

Если сделать преобразование Фурье обеих частей (27.22), то непосредственно получается соотношение

$$\langle \Phi | a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2} a_{\mathbf{k}_3}^+ a_{\mathbf{k}_4} | \Phi \rangle = \langle \Phi | a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2} | \Phi \rangle \langle \Phi | a_{\mathbf{k}_3}^+ a_{\mathbf{k}_4} | \Phi \rangle. \quad (27.23)$$

Соотношение (27.23) дает нам возможность упростить правую часть (27.21). Тогда получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle = (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle + \\ + \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}'} v_{\mathbf{q}'} \{ \langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'} | \Phi \rangle \langle \Phi | a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}'} | \Phi \rangle - \\ - \langle \Phi | a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}'} | \Phi \rangle \langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle \}. \quad (27.24)$$

Уравнение (27.24) можно, используя идею Бомэ и Пайнса, упростить еще больше. Произведения средних значений в правой

части содержат как волновой вектор \mathbf{q} , так и волновой вектор \mathbf{q}' . Средние значения, вообще говоря, являются комплексными величинами, т. е. имеют некоторые фазовые множители $e^{i\varphi}$. Эти фазовые множители зависят, естественно, от операторов a (или их индексов). В частности, от индексов \mathbf{q} и \mathbf{q}' . Предположим теперь, что фазовые множители при $\mathbf{q} \neq \mathbf{q}'$ не связаны друг с другом. Если теперь провести суммирование в правой части (27.24) по \mathbf{q}' , то все члены суммы, ввиду отсутствия корреляции между фазами, выпадают и остается только один, когда фазы скоррелированы, т. е. когда $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$. В рамках этого «приближения случайных фаз» выражение (27.24) переходит в выражение

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle = (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle + 2v_{\mathbf{q}} \{ \bar{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \bar{n}_{\mathbf{k}} \} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'} | \Phi \rangle, \quad (27.25)$$

где использовано сокращенное обозначение

$$\langle \Phi | a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle = \bar{n}_{\mathbf{k}}. \quad (27.26)$$

$\bar{n}_{\mathbf{k}}$ представляет, очевидно, среднее число заполнения состояния \mathbf{k} . Далее полагаем, что \mathbf{q} в уравнениях (27.25) фиксировано, а \mathbf{k} , напротив, может принимать все значения. Поскольку в правой части (27.25) стоит сумма по \mathbf{k}' , то мы по существу имеем дело с системой связанных уравнений для средних значений

$$\langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle. \quad (27.27)$$

Эта система уравнений может быть решена сразу. Для этого перенесем первое выражение, содержащее разность $E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, из правой части (27.25) в левую часть и поделим на общий множитель, вернее сказать оператор, при (27.27). Тогда получаем

$$\langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} | \Phi \rangle = \frac{1}{i\hbar \frac{d}{dt} + (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}})} v_{\mathbf{q}} \{ \bar{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \bar{n}_{\mathbf{k}} \} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'} | \Phi \rangle. \quad (27.28)$$

Поскольку мы уже научились обращаться с операторами, то деление обеих частей (27.28) на выражение, содержащее оператор d/dt , не должно шокировать читателя.

Наша конечная цель состояла в том, чтобы ввести уравнение для фурье-компонент зарядовой плотности или, более точно, для среднего значения (27.12). Для этой цели просуммируем обе части (27.28) по \mathbf{k} , после чего получим уравнение

$$\bar{\rho}_{\mathbf{q}} = \left\{ v_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \bar{n}_{\mathbf{k}}}{i\hbar \frac{d}{dt} + (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}})} \right\} \bar{\rho}_{\mathbf{q}}, \quad (27.29)$$

т. е. уравнение для $\bar{\rho}_q$. Для решения уравнения (27.29) сделаем подстановку

$$\bar{\rho}_q = e^{i\Omega_q t - \alpha t} \bar{\rho}_q(0). \quad (27.30)$$

Дифференциальный оператор d/dt в знаменателе (27.29) при использовании экспоненциальной подстановки (27.30) переходит просто в выражение $i\Omega_q - \alpha$. Поскольку обе части (27.29) сокращаются на $\bar{\rho}_q$, то мы получаем важное соотношение

$$1 = v_q \sum_{\mathbf{k}} \frac{\bar{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \bar{n}_{\mathbf{k}}}{-\hbar\Omega_q - i\hbar\alpha + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}} (\equiv f(\Omega_q)). \quad (27.31)$$

Здесь частота Ω_q и фактор затухания α еще подлежат определению. Положение $\Omega_q(\alpha=0)$ можно увидеть на рис. 35а. На этом

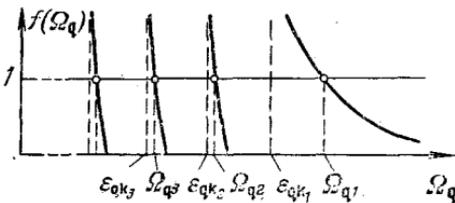


Рис. 35а. Графическое определение энергий возбуждения электронного газа согласно соотношению (27.31) при $\alpha=0$. Для наглядности значения $\epsilon_{q\mathbf{k}}$ при $\mathbf{k}=\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \dots$ на рисунке расположены далеко друг от друга, что дает лишь качественное представление. В реальной ситуации $\epsilon_{q\mathbf{k}}$ находятся очень близко друг от друга. Проекция точек пересечения $f(\Omega_q)$ с единичной ординатой на ось Ω_q дают искомые значения Ω_{qj} .

рисунок Ω является абсциссой, а правая часть (27.31) — ординатой. Проекция точек пересечения графика функции $f(\Omega_q)$ с прямой, проходящей на высоте, равной единице, на ось абсцисс определяют возможные значения Ω . Из этой диаграммы отчетливо видно, что имеются два типа собственных значений: собственные значения, лежащие вблизи $(1/\hbar)(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}})$, и второй тип, лежащий за пределами этой области и имеющий единственное собственное значение. Численный расчет (27.31) для малых значений q показывает, что это собственное значение действительно соответствует плазменной частоте $\Omega = \Omega_{\pi}$ (выражение (27.6)).

Тем самым доказано, что электроны в металле также могут совершать плазменные колебания.

Займемся теперь вопросом, что означают частоты, лежащие в точках $E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}}$. Сделаем подстановку

$$\langle \Phi | a_{\mathbf{k}\mathbf{k}_j+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}\mathbf{k}_j} | \Phi \rangle_t = \langle \Phi | a_{\mathbf{k}\mathbf{k}_j+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}\mathbf{k}_j} | \Phi \rangle_0 e^{i\Omega_{qj} t - \alpha t}, \quad (27.32)$$

$$\Omega_{qj} \approx \epsilon_{q\mathbf{k}_j} \equiv \frac{1}{\hbar} (E_{\mathbf{k}_j+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}_j})$$

в уравнение (27.25). Тогда можно увидеть, что с точностью до

малых поправок члены

$$\langle \Phi | a_{k_j+q}^+ a_{k_j} | \Phi \rangle (E_{k_j} - E_{k_j+q}) \quad (27.33)$$

в обеих частях для определенного k_j выпадают. Оставшиеся в (27.25) суммы должны быть, следовательно, исчезающе малыми. Это согласуется с тем, что тем самым удовлетворяются и остальные уравнения для $k \neq k_j$ и, следовательно, средние значения (27.32) для $k \neq k_j$ практически равны нулю. Из этих соображений становится очевидно, что собственным значениям (27.32) соответствуют возбуждения, при которых только один электрон рождается в новом состоянии. Таким образом, это ни в коем случае не коллективное возбуждение.

Коллективные плазменные возбуждения могут быть обнаружены экспериментально. Если, например, пропускать через тонкую фольгу электроны, то они могут дискретным образом передавать свою энергию плазменным колебаниям.

§ 28. Спиновые волны: магноны

а) **Причина возникновения ферромагнетизма.** Магнитные свойства ферромагнетика можно объяснить, вообще говоря, и в рамках классической физики, если считать, что ферромагнетик состоит из отдельных элементарных атомарных магнитов, которые выстраиваются под воздействием собственного, созданного ими же «внутреннего поля». Однако два следующих центральных вопроса в рамках классической физики остаются без ответа:

1. Какова природа элементарных магнитов?
2. Какова природа «внутреннего поля»?

Ввиду того, что напряженность «внутреннего поля» очень велика, его природу нельзя объяснить магнитным полем элементарных магнитов.

Квантовая теория дает следующий ответ:

К п. 1: каждый электрон независимо от его орбитального движения обладает моментом импульса s , так называемым спином. Этот момент импульса квантован и принимает в выделенном направлении (созданным, например, наложенным вдоль оси z магнитным полем) значения $s_z = +\hbar/2$ или $s_z = -\hbar/2$. В механической модели динамическое поведение спина можно описать, используя аналогию с волчком. Со спином связан магнитный момент, имеющий величину магнетона Бора $M = e\hbar/(2mc)$; здесь e — заряд, m — масса электрона, а c — скорость света. Элементарные магниты можно прямо идентифицировать с магнитным диполем, который связан со спином.

К п. 2: спин электронов косвенным образом влияет на их орбитальное движение (даже если нет спин-орбитальной связи). Это соображение вытекает из принципа Паули.

Согласно этому принципу невозможно привести в одно и то же состояние два электрона с параллельными спинами. Как мы уже видели в § 13, отсюда следует, что волновая функция $f(x_1, x_2)$ антисимметрична по обоим координатам. Но с другой стороны, можно показать, что волновая функция двух электронов с антипараллельными спинами симметрична относительно координат. Следовательно, *положение спина определяет симметрию волновой функции.*

Используя в качестве примера модель Гайтлера — Лондона молекулы водорода, покажем, как зависит полная энергия от

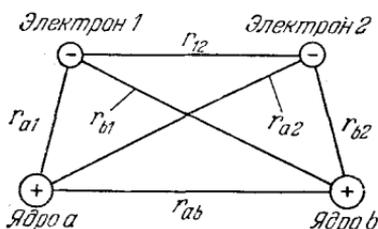


Рис. 36. Молекула водорода. Система координат.

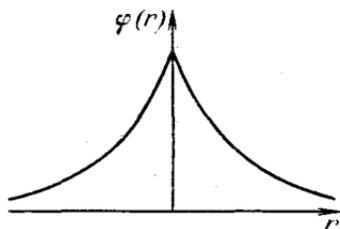


Рис. 37. Вид $\varphi(r)$ атома водорода.

симметрии волновых функций. Рассмотрим случай, когда между обоими закрепленными в пространстве протонами, обоими электронами и между электронами и протонами действует только *кулоновское взаимодействие*. Расстояние между частицами обозначим через $r_{\alpha\beta}$ ($1, 2$ для электронов; a, b для протонов) (рис. 36).

Уравнение Шредингера (13.31) имеет вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) + e^2 \left(\frac{1}{r_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} \right) \right\} \times \\ \times \varphi(x_1, x_2) = E \varphi(x_1, x_2). \quad (28.1)$$

Для приближенного решения этого уравнения положим (с точностью до нормировочного множителя)

$$\begin{aligned} \varphi_{\uparrow\uparrow} &= \varphi(r_{a1}) \varphi(r_{b2}) - \varphi(r_{a2}) \varphi(r_{b1}) && \text{параллельные спины,} \\ & && (28.2) \\ \varphi_{\uparrow\downarrow} &= \varphi(r_{a1}) \varphi(r_{b2}) + \varphi(r_{a2}) \varphi(r_{b1}) && \text{антипараллельные спины.} \end{aligned}$$

Стрелки указывают относительные направления спинов электронов. $\varphi(r_{\alpha j})$ является действительной волновой функцией электрона j ($= 1, 2$) в основном состоянии атома водорода α ($= a, b$) (рис. 37).

С помощью (28.2) построим среднее значение стоящего в (28.1) гамильтониана

$$E_{\uparrow\uparrow}(r_{ab}) = \int \int \varphi_{\uparrow\uparrow} H \varphi_{\uparrow\uparrow} d^3x_1 d^3x_2, \quad E_{\uparrow\downarrow}(r_{ab}) = \int \int \varphi_{\uparrow\downarrow} H \varphi_{\uparrow\downarrow} d^3x_1 d^3x_2. \quad (28.3)$$

После простых вычислений приближенно находим

$$E_{\uparrow\uparrow} = E_0 - A, \quad E_{\uparrow\downarrow} = E_0 + A. \quad (28.4)$$

Таким образом, энергии в зависимости от направления спина отличаются на $2A$, причем обменный интеграл A имеет следующий вид:

$$A = A(r_{ab}) = \int \varphi(r_{a1}) \varphi(r_{b1}) e^2 \left(\frac{1}{r_{ab}} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} \right) \varphi(r_{a2}) \varphi(r_{b2}) d^3x_1 d^3x_2. \quad (28.4a)$$

Очевидно, что A зависит от расстояния r_{ab} между ядрами. В то время как в молекуле водорода $A < 0$, в ферромагнетиках $A > 0$ (поскольку там должны быть использованы другие волновые функции $\varphi(r)$).

Хотя спин явно не присутствует в (28.4), знак этого интеграла A зависит от него. Поэтому мы обсудим теперь формализм, в котором явно учитывается наличие спина, и начнем это обсуждение с разъяснения свойств операторов спина.

б) Операторы спина. Поскольку по своей физической природе спин близок к моменту количества движения, то операторы спина удовлетворяют перестановочным соотношениям для момента количества движения, которые мы запишем в виде

$$[s_x s_y - s_y s_x = i s_z, \quad s_y s_z - s_z s_y = i s_x, \quad s_z s_x - s_x s_z = i s_y. \quad (28.5)$$

Множитель \hbar у спиновых операторов опущен. Компоненты s_x , s_y и s_z можно, естественно, объединить в вектор

$$[s = (s_x, s_y, s_z). \quad (28.6)$$

В случае нескольких спинов каждому из них следует поставить в соответствие вектор вида

$$s_m = (s_{xm}, s_{ym}, s_{zm}). \quad (28.7)$$

Поскольку отдельные спины представляют совершенно различные не связанные друг с другом степени свободы, мы можем принять, что операторы спина различных электронов коммутируют друг с другом:

$$[s_{jm} s_{j',m'} - s_{j',m'} s_{jm} = 0 \quad \text{при } m \neq m'. \quad (28.8)$$

Для наших последующих целей вместо первоначальных операторов

s_x и s_y будет удобно ввести новые операторы вида

$$s^+ = s_x + is_y, \quad s^- = s_x - is_y. \quad (28.9)$$

Определение (28.9) справедливо для любых по величине спинов. Мы ограничимся спином $1/2$. Собственные функции оператора s_z обозначим $\Phi(\uparrow)$ (спин направлен вверх) и $\Phi(\downarrow)$ (спин направлен вниз). Тогда справедливы следующие уравнения:

$$\left| \begin{array}{l} s_z \Phi(\uparrow) = \frac{1}{2} \Phi(\uparrow), \quad s_z \Phi(\downarrow) = -\frac{1}{2} \Phi(\downarrow). \end{array} \right. \quad (28.10)$$

Далее, как можно показать (см. задание 1), справедливы соотношения

$$\left| \begin{array}{l} s^+ \Phi(\downarrow) = \Phi(\uparrow), \quad s^- \Phi(\uparrow) = \Phi(\downarrow). \end{array} \right. \quad (28.11)$$

Таким образом, благодаря действию оператора s^+ на состояние со спином, направленным вниз, возникает состояние со спином, направленным вверх.

Так как направленный вверх спин нельзя еще раз повернуть вверх, то отсюда сразу следует выполнение соотношения

$$\left| \begin{array}{l} (s^+)^2 = 0. \end{array} \right. \quad (28.12)$$

Аналогично, имеет место соотношение

$$\left| \begin{array}{l} (s^-)^2 = 0. \end{array} \right. \quad (28.13)$$

Далее, из перестановочных соотношений (28.5) следует

$$\left| \begin{array}{l} s^+ s^- - s^- s^+ = 2s_z. \end{array} \right. \quad (28.14)$$

И, наконец, для спина $1/2$ следует соотношение

$$\left| \begin{array}{l} s^- s^+ + s^+ s^- = 1, \end{array} \right. \quad (28.15)$$

как можно сразу увидеть, если построить какую-либо функцию из комбинации функций со спином вверх и вниз.

в) Обменный гамильтониан и гейзенберговская модель ферромагнетизма. Мы продолжим рассмотрение проблемы из раздела а) этого параграфа и выразим $E_{\uparrow\downarrow}$, $E_{\uparrow\uparrow}$ (28.4) прямо через операторы спина s_1 и s_2 . Поскольку $E_{\uparrow\downarrow}$, $E_{\uparrow\uparrow}$ зависят от относительного направления спина, то имеет смысл ввести эффективный гамильтониан следующего вида:

$$H = \text{const} - J s_1 s_2. \quad (28.16)$$

Этот гамильтониан, как показывает точное квантовомеханическое вычисление с помощью операторов спина, дает правильные собственные значения энергии $E_{\uparrow\uparrow}$, $E_{\uparrow\downarrow}$, если

$$J = J_{\mathbf{r}} = 2A(\mathbf{r}) \quad (\text{где } \mathbf{r} = \mathbf{r}_{ab}) \quad (28.16a)$$

(см. задание 2).

Обобщим теперь оператор (28.16) на систему многих электронов, находящихся в узлах кристаллической решетки. Вектор, определяющий расстояние между узлами кристаллической решетки l и m , обозначим $l - m$. Тогда обменный гамильтониан можно сразу представить в виде

$$H_a = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq m} J_{l-m} s_l s_m, \quad (28.17)$$

причем постоянную энергию мы опустили и выбрали индексы спинов соответственно индексам узлов решетки, в которых они локализованы. Не ограничивая общности, можно принять, что обменное взаимодействие симметрично относительно векторов l и m , т. е. справедливо соотношение

$$J_{l-m} = J_{m-l}. \quad (28.17a)$$

Если бы интеграл J не был симметричным, то можно было бы без труда (учитывая, что s_l и s_m можно переставлять) симметризовать его. Множитель $1/2$ учитывает, что пара электронов l, m в сумме (28.17) встречается дважды, а именно, в виде $s_l s_m$ и $s_m s_l$. Оператор полного спина

$$S = \sum_l s_l, \quad (28.18)$$

как можно показать (см. задание 3), коммутирует с обменным гамильтонианом, т. е.

$$[H_a, S] = 0. \quad (28.19)$$

Для некоторых целей полезно выразить исходные операторы s_l, s_m через операторы s_l^+, s_m^- . Как можно показать (см. задание 4), обменный оператор Гамильтона (28.17) при этом принимает следующий вид:

$$H_a = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq m} J_{l-m} (s_l^+ s_m^- + s_l s_m). \quad (28.20)$$

Это, как и прежде, оператор, используемый в модели Гейзенберга. Наряду с этим оператором применяется, особенно в квантовой статистике, другой модельный оператор, а именно так называемый оператор «модели Изинга», в котором операторы s^+, s^- опущены:

$$H_a = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq m} J_{l-m} s_{z_l} s_{z_m}. \quad (28.21)$$

В нашем рассмотрении, однако, мы примем за основу оператор (28.20).

В операторе (28.20) наряду с операторами s^+, s^- стоят операторы s_z . Эти операторы также можно простым образом выра-

зять через операторы s^+ и s^- . Из соотношений (28.14) и (28.15) для спина $1/2$ следует соотношение

$$s_z = -\frac{1}{2} + s^+s^-. \quad (28.22)$$

Если подставить (28.22) для различных узлов решетки l и m в (28.20), то оператор Гамильтона примет вид

$$H_a = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq m} J_{l-m} \left\{ s_l^+ s_m^- + \frac{1}{4} - s_l^+ s_l^- + s_l^+ s_l^- s_m^+ s_m^- \right\}. \quad (28.23)$$

Соответственно количеству стоящих в (28.23) операторных выражений разложим H_a на три части:

$$H_a = C + H^{(1)} + H^{(2)}, \quad (28.24)$$

где C — независящая от операторов константа:

$$C = -\frac{1}{8} \sum_{l \neq m} J_{l-m}. \quad (28.25)$$

Оператор $H^{(1)}$ билинеен по операторам s^+ и s^- :

$$H^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq m} s_l^+ s_m^- \tilde{J}_{lm}. \quad (28.26)$$

Здесь использовано сокращенное обозначение

$$\tilde{J}_{lm} = J_{l-m} - \delta_{lm} \sum_{m'} J_{l-m'}. \quad (28.27)$$

Формальное различие между (28.23) и (28.26) связано с тем, что все билинейные члены в (28.23) формально можно записать в виде (28.26). Наконец, $H^{(2)}$ содержит члены порядка выше второго. Эти члены мы выпустим из рассмотрения, полагая, что они дают лишь малый вклад. Более того, мы увидим, что в определенных случаях эти члены точно пропадают. Штрих у знака суммы в (28.27) и стоящий за ним индекс l указывает на то, что член суммы с $m'=l$ опущен. Эту сумму кратко обозначим в виде

$$\sum_{m'}^{(1)} J_{l-m'} = J(0). \quad (28.28)$$

Поскольку стоящий в (28.28) в функции J вектор при сдвиге на любой из векторов решетки не изменяется, то сумма действительно не зависит от индекса l .

После этих подготовительных замечаний попытаемся решить уравнение Шредингера с оператором Гамильтона (28.23) $H_a \Phi = E \Phi$. Поскольку H_a коммутирует, в частности, с S_z , то следует попытаться так определить волновые функции, чтобы они

одновременно были еще и собственными функциями суммарной компоненты оператора спина в направлении z :

$$s_z \Phi = M \Phi. \quad (28.29)$$

Начнем с решения (28.29) и будем искать основное состояние системы, в котором все спины параллельны и направлены вдоль направления z . Эта волновая функция имеет вид

$$\Phi_g = \Phi(\downarrow \downarrow \downarrow \dots \downarrow) = \prod_m \Phi_m(\downarrow), \quad (28.30)$$

причем произведение распространяется на все N узлов решетки. $\Phi_m(\downarrow)$ является собственной волновой функцией оператора $s_{z,m}$ со спином, направленным вниз. Собственное значение, соответствующее Φ_g , равно

$$M = -\frac{N}{2}. \quad (28.31)$$

Если теперь подействовать на функцию (28.30) в каком-либо узле решетки l оператором переворота спина s_l^- , то получится (см. (28.13) и приведенные там соображения)

$$s_l^- \Phi_g(\downarrow \dots \downarrow) = 0. \quad (28.32)$$

Подействуем теперь полным оператором Гамильтона (28.23) на функцию (28.30). Ввиду свойства (28.32) после этого остается только постоянный член (28.25). Энергия этого основного состояния дается выражением

$$E_g = -\frac{1}{8} \sum_{l \neq m} J_{l-m}, \quad (28.33)$$

причем суммирование следует провести по всем отличающимся друг от друга индексам l и m . Теперь попытаемся, исходя из этого основного состояния, сконструировать первое возбужденное состояние. Для этого вновь сначала ищем собственную функцию оператора (28.29), однако для такого состояния, в котором один спин перевернут. Соответствующее собственное значение дается выражением

$$M = -\frac{N}{2} + 1. \quad (28.34)$$

Поскольку спин может быть перевернут в любом узле l решетки, то имеется целый набор волновых функций

$$\Phi(\uparrow_l \dots \downarrow), \dots, \Phi(\downarrow \dots \uparrow_l \dots \downarrow), \quad (28.35)$$

которым соответствует одно и то же собственное значение энергии (28.34) в уравнении (28.29). Для того чтобы решить уравне-

ние Шредингера с оператором Гамильтона (28.23), представим функцию Φ как комбинацию состояний (28.35):

$$\Phi = \sum_{\mathbf{l}} c_{\mathbf{l}} \Phi(\downarrow \dots \downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow). \quad (28.36)$$

Так как кристалл трансляционно симметричен, то можно, как и в случае блоховских функций, прийти к заключению, что коэффициенты $c_{\mathbf{l}}$ должны иметь вид

$$c_{\mathbf{l}} = c_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} \quad (28.37)$$

Далее воспользуемся приемом, который позволяет записать функцию (28.35) в более элегантном виде. Относительно операторов спина (см. (28.11)) нам известно, что оператор $s_{\mathbf{l}}^+$ имеет свойство превращать спиновую функцию со спином вниз в спиновую функцию со спином вверх. Поэтому можно воспользоваться следующим соотношением:

$$\Phi(\downarrow \dots \downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow) = s_{\mathbf{l}}^+ \Phi_g, \quad (28.38)$$

где Φ_g дается выражением (28.30). С учетом (28.37) и (28.38) волновая функция (28.36) принимает вид

$$\Phi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} s_{\mathbf{l}}^+ \Phi_g, \quad (28.39)$$

где \mathbf{k} — обычный волновой вектор. Совершенно очевидно, что функция (28.39) представляет спиновую волну, распространяющуюся по кристаллу и обладающую волновым вектором \mathbf{k} . Здесь обнаруживается явная формальная аналогия с оператором рождения гармонического осциллятора. При рассмотрении гармонического осциллятора мы видели, что возбужденное состояние может быть создано действием оператора рождения на основное состояние. В данном случае из уравнения (28.39) также видно, что *спиновая волна*, т. е. возбужденное состояние, может быть создана действием *оператора*

$$S_{\mathbf{k}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} s_{\mathbf{l}}^+ \quad (28.40)$$

на основное состояние. С помощью (28.40) состояние (28.39), в котором присутствует спиновая волна, можно представить в виде

$$\Phi_{\mathbf{k}} = S_{\mathbf{k}}^+ \Phi_g. \quad (28.41)$$

Введем эрмитово сопряженный (28.40) оператор

$$S_{\mathbf{k}}^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} s_{\mathbf{l}}^-, \quad (28.42)$$

который кажется естественным сопоставить оператору уничто-

жения. Обратное, отдельные спиновые операторы можно получить обращением Фурье-преобразования (28.40) и (28.42):

$$s_1^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}} S_{\mathbf{k}}^+, \quad (28.43)$$

$$s_1^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}} S_{\mathbf{k}}^-. \quad (28.44)$$

Согласно проводимой нами аналогии с гармоническим осциллятором имеет смысл попробовать переформулировать теперь оператор Гамильтона (28.24) с помощью операторов (28.40) и (28.42). Ограничимся стоящим в (28.24) оператором $H^{(1)}$, который дается выражением (28.26). Часть $H^{(2)}$ содержит более высокие степени s , которые даже в случае гармонического осциллятора невозможно рассмотреть точно. Мы проведем преобразование спиновых операторов, соответствующим отдельным узлам решетки, в операторы спиновой волны (28.40) и (28.42). Для этого выразим в $H^{(1)}$ (см. (28.26)) операторы s_1^+ и s_1^- через операторы спиновой волны $S_{\mathbf{k}}$. Это дает сначала

$$H^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l} \neq \mathbf{m}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}} S_{\mathbf{k}}^+ \tilde{J}_{\mathbf{l}\mathbf{m}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{m}} S_{\mathbf{k}'}^-, \quad (28.45)$$

или, после простого изменения порядка суммирования,

$$H^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} S_{\mathbf{k}}^+ S_{\mathbf{k}'}^- \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{l} \neq \mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{m}} \tilde{J}_{\mathbf{l}\mathbf{m}} \right). \quad (28.46)$$

Так как

$$\mathbf{l} = (\mathbf{l} - \mathbf{m}) + \mathbf{m}, \quad (28.47)$$

то сумму, стоящую в (28.46) в скобках, можно разложить следующим образом:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}} \underbrace{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{m}}}_{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \sum_{\mathbf{l}}^{(m)} \underbrace{e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{m})}}_{-2E(\mathbf{k})} \tilde{J}_{\mathbf{l}\mathbf{m}}. \quad (28.48)$$

Первая сумма в (28.48) очевидным образом представляет собой символ Кронекера $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, а вторая сумма зависит от волнового вектора \mathbf{k} и не зависит, ввиду свойства трансляционной симметрии, от индекса \mathbf{m} . Так как (28.48) имеет размерность энергии, то мы запишем это выражение в виде $-2E(\mathbf{k})$. После этих промежуточных результатов получаем, наконец, для $H^{(1)}$ выражение

$$H^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}^+ S_{\mathbf{k}}^- E(\mathbf{k}). \quad (28.49)$$

Теперь могло бы показаться, что согласно этому результату проблема спиновых волн сводится к проблеме гармонического

осциллятора. Выражение (28.49) имеет точно тот же вид, что и набор операторов Гамильтона отдельных осцилляторов, где операторы $S_{\mathbf{k}}^+$, $S_{\mathbf{k}}^-$ соответствуют операторам $b_{\mathbf{k}}^+$, $b_{\mathbf{k}}^-$.

Однако предлагаемый пример может служить предостережением против поспешности в подобного рода операторных вычислениях. Ведь мы еще не установили, каким перестановочным соотношениям удовлетворяют операторы (28.40) и (28.42). Только после этого можно было бы с уверенностью сказать, является ли аналогия с гармоническим осциллятором гарантированной или нет. Если образовать перестановочные соотношения, вновь выразив (28.40) и (28.42) через операторы спина в узлах решетки, то получим

$$S_{\mathbf{k}}^- S_{\mathbf{k}'}^+ - S_{\mathbf{k}'}^+ S_{\mathbf{k}}^- = \frac{1}{N} \sum_{\Pi'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l} + i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{l}'} \underbrace{\{s_{\mathbf{l}}^- s_{\mathbf{l}'}^+ - s_{\mathbf{l}'}^+ s_{\mathbf{l}}^-\}}_{\delta_{\Pi'(-2s_{z1})}}. \quad (28.50)$$

Правая часть (28.50) после использования перестановочных соотношений для операторов $s_{\mathbf{l}}^+$ и $s_{\mathbf{l}}^-$ принимает вид

$$-\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{l}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot\mathbf{l}} s_{z1}. \quad (28.51)$$

К сожалению, как следует из (28.50) и (28.51), получаются никоим образом не осцилляторные перестановочные соотношения. Этот результат станет чуть-чуть получше, если построить среднее значение (28.51) на собственных функциях (28.29). Тогда в общем случае можно положить

$$\langle \Phi | s_{z1} | \Phi \rangle = \bar{s}_{z1}. \quad (28.52)$$

Если использовать в качестве Φ волновую функцию основного состояния, то получим

$$\Phi = \Phi_g: \bar{s}_{z1} = -\frac{1}{2}. \quad (28.53)$$

В этом случае, как сразу видно, правая часть (28.50) становится символом Кронекера $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ и мы получаем

$$S_{\mathbf{k}}^- S_{\mathbf{k}'}^+ - S_{\mathbf{k}'}^+ S_{\mathbf{k}}^- = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (28.54)$$

Аналогичным образом можно было бы ожидать, что результат (28.54) останется приблизительно справедливым, если вместо основного состояния Φ_g теперь в (28.52) использовать волновые функции, в которых перевернуто лишь относительно небольшое число спинов.

В любом случае следует констатировать, что перестановочные соотношения между операторами $S_{\mathbf{k}}^+$ и $S_{\mathbf{k}}^-$ не являются точно бозевскими перестановочными соотношениями. Можно, конечно, задаться вопросом, нельзя ли так видоизменить опреде-

ление операторов S^\pm , чтобы получились действительно точные бозе-операторы. Это можно сделать с помощью *преобразования Хольштейна — Примакова*. Для этого рассмотрим отдельный спин и попытаемся выразить его операторы s^+ , s^- и s_z через бозе-операторы b^+ и b . Для этого представим s_z в виде

$$s_z = -\frac{1}{2} + b^+b, \quad (28.55)$$

где s_z в основном состоянии соответствующего гармонического осциллятора $= -1/2$, а в первом возбужденном состоянии, напротив, $= +1/2$. Поскольку в перестановочных соотношениях (28.50) в правой части стоит s_z , то при преобразовании s^+ и s^- в бозе-операторы кажется разумным ввести нормировочный множитель, грубо говоря, вида $\sqrt{s_z}$. Этот подход еще не совсем точен, однако он дает основополагающую идею. А именно, если сделать следующие подстановки (*преобразование Хольштейна — Примакова*):

$$s^+ = b^+ \sqrt{1 - b^+b}, \quad (28.56)$$

$$s^- = \sqrt{1 - b^+b} b, \quad (28.57)$$

то оказывается, что, например, s^+ и s^- удовлетворяют перестановочному соотношению

$$s^+s^- - s^-s^+ = 2s_z \quad (28.58)$$

(см. задание 6).

Аналогичным образом удовлетворяются перестановочные соотношения между s^+ и s_z , а также s^- и s_z , если использовать для s^- и s_z правые части уравнений (28.55) и (28.57), а для b принять бозевские перестановочные соотношения. Очевидно, что преобразования (28.56) и (28.57) только тогда имеют смысл, когда соответствующий гармонический осциллятор лишь слабо возбужден, так что среднее значение b^+b меньше единицы. Преобразования (28.55—28.57) можно провести для каждого спина в узле \mathbf{l} и тем самым выразить оператор Гамильтона (28.20) через операторы $b_1^+b_1$. В этом случае b_1^+ и b_1 являются операторами осциллятора, которые ставятся в соответствие локальному спину. Теперь можно разложить радикалы по операторам $b_1^+b_1$ и перейти от локальных бозевских операторов к таким, которые соответствуют бегущим волнам, т. е., например, к операторам

$$b_1^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} B_{\mathbf{k}}^+. \quad (28.59)$$

Следует помнить, что при этом индекс \mathbf{l} относится к *локализованным* осцилляторам, а индекс \mathbf{k} , напротив, относится к осцил-

ляторам, соответствующим бегущим волнам. Операторы $B_{\mathbf{k}}^+$ и эрмитово сопряженные им операторы $B_{\mathbf{k}}$ вновь удовлетворяют бозе-перестановочным соотношениям.

Все члены нового оператора Гамильтона, вплоть до квадратных, теперь совпадают с членами прежнего выражения для H , если только заменить $S_{\mathbf{k}}^+$ и $S_{\mathbf{k}}^-$ на операторы $B_{\mathbf{k}}^+$ и $B_{\mathbf{k}}$. Преимущество преобразования Хольштейна — Примакова состоит в том, что оно систематическим образом выявляет те отклонения в членах высшего порядка, которые возникают из-за того, что S^+ и S^- не точно удовлетворяют бозевским соотношениям.

В литературе, вообще говоря, имеются другие методы, например метод индефинитной метрики, однако мы не будем углубляться в них.

Задания к § 28

1. Доказать (28.11).

Указание. Умножить (28.10) слева на s^- или s^+ и воспользоваться (28.14).

2. Определить общую собственную функцию для $(s_1 + s_2)^2$ и $s_{1z} + s_{2z}$ и показать, что при подходящем выборе «const» и J в (28.16) этот оператор Гамильтона дает правильные собственные значения энергии (28.4).

3. Показать, что (28.18) коммутирует с (28.17).

4. С помощью (28.9) преобразовать (28.17) в (28.20).

5. Сравнить экситоны Френкеля со спиновыми волнами. Для этого воспользоваться аналогией $s_1^+ \leftrightarrow a_1^+ d_1^+$, $s_1^- \leftrightarrow d_1 a_1$.

6. Доказать, что для операторов (28.55—28.57) имеет место перестановочное соотношение (28.58).

Глава V. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С КОЛЕБАНИЯМИ РЕШЕТКИ

§ 29. Гамильтониан Фрёлиха для взаимодействия между электронами и фононами

В этом параграфе будет введен оператор Гамильтона для взаимодействия между электронами и колебаниями решетки. Основная идея этой главы состоит в том, чтобы по возможности просто представить как движение электронов, так и колебания решетки. Для этого предположим, что электроны находятся вблизи нижнего края зоны, т. е. их функция Блоха имеет малый волновой вектор \mathbf{k} и тем самым соответствующие длины волн велики сравнительно с постоянной решетки. Равным образом примем, что для взаимодействия с электронами важны только такие колебания решетки, длины волн которых много больше постоянной решетки. В обоих случаях кажется естественным отвлечься от детальной структуры решетки и рассматривать движение электронов и ионов в континуальной модели.

Вначале рассмотрим

а) Полярные кристаллы. Исследуем вначале поляризационные колебания. Эти поляризационные колебания будем рассматривать, руководствуясь классической электродинамикой. Припомним кратко, как рассматривают поляризацию $\mathbf{P}(\mathbf{x})$ среды в классической электродинамике. Для этого вначале исходят из отдельного диполя. Обозначим вектором \mathbf{q} расстояние между зарядами диполя, колеблющуюся массу диполя — через m , а его собственную частоту — через ω . Полная энергия тогда дается выражением

$$\frac{m}{2} (\dot{\mathbf{q}}^2 + \omega^2 \mathbf{q}^2). \quad (29.1)$$

От находящихся в узлах решетки дискретных диполей перейдем к непрерывному распределению диполей. При этом будем считать, как это обычно предполагается в теории дисперсии, что диполи не связаны друг с другом.

В остальном предельный переход к непрерывному распределению проводится совершенно аналогично § 9. При этом нужно только еще учесть, что в итоге мы ищем не отклонение \mathbf{q} , а выводим уравнение для дипольного момента и затем переходим, в смысле обычной электродинамики, от дипольного момента к плотности диполей. Если эффективный заряд, входящий в ди-

польный момент, обозначить e^* , то следует, таким образом, сделать замену

$$e^* q_n \rightarrow P(x). \quad (29.2)$$

Далее, как обычно, введем с помощью соотношения

$$m = \rho d^3 x \quad (29.3)$$

плотность массы. Если воспользоваться сокращением

$$\frac{m}{e^{*2}} = \gamma d^3 x, \quad (29.4)$$

то кинетическая T и потенциальная U энергии свободных колебаний поля поляризации принимают вид

$$T = \int \frac{\gamma}{2} \dot{P}^2(x) d^3 x, \quad U = \int \frac{\gamma \omega^2}{2} P^2(x) d^3 x. \quad (29.5)$$

В то время как частоту ω можно отождествить с частотой оптических колебаний решетки (мы вскоре увидим, что нам следует учитывать только продольные колебания), константа γ должна быть еще определена из феноменологической теории.

Для этого рассмотрим энергию взаимодействия между электронами и поляризационными колебаниями. Согласно электростатике, энергия взаимодействия электронного заряда e в точке x с дипольным моментом P в точке x' дается выражением

$$e \frac{(x - x')}{|x - x'|^3} P. \quad (29.6)$$

В случае непрерывно распределенной зарядовой плотности $\rho(x)$ и непрерывно распределенной плотности диполей $P(x')$ выражение (29.6) переходит в

$$\rho(x) d^3 x \frac{(x - x')}{|x - x'|^3} P(x') d^3 x'. \quad (29.7)$$

Интегрируя по x и x' , получаем выражение для энергии взаимодействия $E_{вз}$ поля поляризации $P(x)$ с непрерывно распределенной зарядовой плотностью $\rho(x)$:

$$E_{вз} = \iint \rho(x) \frac{(x - x')}{|x - x'|^3} P(x') d^3 x d^3 x'. \quad (29.8)$$

Предположим на время, что плотность заряда $\rho(x)$ задана, и исследуем уравнения движения для поляризационных колебаний под влиянием зарядовой плотности $\rho(x)$. Функция Лагранжа, как известно, имеет вид

$$L = T - U - E_{вз}. \quad (29.9)$$

Уравнение движения получаем из уравнений Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{P}_j} - \frac{\delta L}{\delta P_j} = 0, \quad j = x, y, z. \quad (29.10)$$

Проведение операции варьирования δ уже обсуждалось подробно в § 9. С помощью уравнения (29.10) и явных выражений (29.5) и (29.8) сразу же находим уравнение движения

$$\gamma (\ddot{\mathbf{P}}(\mathbf{x}') + \omega^2 \mathbf{P}(\mathbf{x}')) = - \underbrace{\int \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} \rho(\mathbf{x}) d^3x}_{\mathbf{D}(\mathbf{x}')} \quad (29.11)$$

Правая часть этого уравнения согласно элементарным формулам классической электростатики представляет собой электрическое смещение $\mathbf{D}(\mathbf{x})$, которое создается зарядовой плотностью $\rho(\mathbf{x})$. Для отыскания не определенной до сих пор постоянной γ рассмотрим уравнение (29.11) в статическом случае. Тогда получаем

$$\gamma \omega^2 \mathbf{P}(\mathbf{x}') = \mathbf{D}(\mathbf{x}'). \quad (29.12)$$

Напряженность поля и смещение, как известно, связаны друг с другом соотношениями

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}_{\text{общ}}, \quad (29.13)$$

$$\text{или } \mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}. \quad (29.14)$$

Комбинируя (29.13) и (29.14), получаем непосредственно соотношение

$$4\pi \mathbf{P}_{\text{общ}} = \left(1 - \frac{1}{\epsilon}\right) \mathbf{D}. \quad (29.15)$$

При этом через $\mathbf{P}_{\text{общ}}$ мы обозначили полную поляризацию, которая создается как поляризацией электронов ионных оболочек так и смещениями ионов. Оба эти механизма поляризации отключаются на присутствие статического поля, так что под ϵ следует понимать статическую диэлектрическую проницаемость. Нас, однако, интересует только та часть, которая связана с поляризацией собственно решетки. Чтобы выделить эту часть, представим себе, что после того, как поле было медленно включено, оно очень быстро выключается. При быстром выключении за полем могут следовать только электроны, так что в этом случае мы получаем связь между поляризацией и смещением \mathbf{D} , которая формально выглядит как (29.15), однако теперь левая часть относится только к электронной поляризации $\delta \mathbf{P}$, а ϵ теперь следует заменить на диэлектрическую проницаемость при очень высоких (порядка

оптических) частотах. Отсюда находим соотношение

$$4\pi\delta\mathbf{P} = -\left(1 - \frac{1}{\varepsilon_\infty}\right)\mathbf{D}. \quad (29.16)$$

Складывая (29.15) и (29.16) (при этом следует обратить внимание на знак минус перед $\delta\mathbf{P}$, который появляется из-за выключения поля), получаем для той части поляризации, которая создается только колебаниями решетки, следующее выражение:

$$4\pi\mathbf{P} = 4\pi(\mathbf{P}_{\text{общ}} + \delta\mathbf{P}) = \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon}\right)\mathbf{D}. \quad (29.17)$$

Если сравнить теперь (29.12) с (29.17), то мы получим, наконец, оставшуюся не определенной до сих пор константу γ :

$$\gamma = \frac{4\pi}{\omega^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon}\right)^{-1}. \quad (29.18)$$

Чтобы получить полный оператор Гамильтона — поляризационные колебания плюс электроны — следует еще добавить часть, описывающую энергию электронов. Для того, будем считать, как уже предполагалось ранее, что электроны находятся на нижнем крае зоны и во взаимодействие с колебаниями решетки дают вклад только сравнительно большие длины волн. Это означает, что можно уверенно воспользоваться методом эффективной массы, т. е. полностью отвлечься от периодичности потенциала электрического поля и описывать электроны только с помощью их эффективной массы m^* . Если вновь операторы электронного волнового поля обозначить через $\psi^+(\mathbf{x})$, $\psi(\mathbf{x})$, то

$$H_{\text{эл}} = \int \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta\right) \psi(\mathbf{x}) d^3x. \quad (29.19)$$

При этом одновременно классическая плотность заряда $\rho(\mathbf{x})$ переходит в оператор зарядовой плотности:

$$\rho(\mathbf{x}) = e\psi^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}). \quad (29.20)$$

Если подставить (29.20) в (29.8) и провести интегрирование по частям по координате \mathbf{x}' , то $H_{\text{вз}}$ переходит в выражение

$$H_{\text{вз}} = \iint \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \frac{e}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} (-\text{div}_{\mathbf{x}'} \mathbf{P}(\mathbf{x}')) d^3x d^3x'. \quad (29.21)$$

Тем самым мы получили все необходимые выражения, чтобы построить полный гамильтониан. Для этого припомним еще замечание из параграфа об «электронах, танцующих на канате», что оператор Гамильтона взаимодействующей системы получается следующим образом: вначале составляется оператор Гамильтона одной подсистемы с учетом влияния на нее другой подсистемы, а затем к ней прибавляется энергия (без учета взаимодействия)

второй подсистемы. Здесь мы уже ввели выражение для энергии подсистемы поляризаационных колебаний. Теперь нам необходимо лишь добавить энергию свободного электронного поля. Если в выражение для энергии (29.5) вместо $\dot{\mathbf{P}}$ ввести канонически сопряженный \mathbf{P} импульс Π и собрать вместе выражения (29.5), (29.19) и (29.21), то получим, наконец, наш полный оператор Гамильтона

$$H = \int \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right) \psi(\mathbf{x}) d^3x + \int \left(\frac{1}{2\gamma} \Pi^2(\mathbf{x}) + \frac{\gamma}{2} \omega^2 \mathbf{P}^2(\mathbf{x}) \right) d^3x + \\ + \iint \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}') \frac{e}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} (-\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}(\mathbf{x}')) d^3x d^3x'. \quad (29.22)$$

Если рассмотреть в (29.21) член $\operatorname{div} \mathbf{P}$, то с помощью разложения по плоским волнам можно обнаружить, что в нем остаются только продольные волны. Поэтому с самого начала в полном операторе Гамильтона (29.22) можно ограничиться продольными колебаниями решетки.

Выражение (29.22) вначале можно рассматривать как классическое выражение для энергии классического поля поляризации и шредингеровского волнового поля. В этом отношении (29.22) представляет собой феноменологическое выражение для энергии. Однако у нас есть все необходимые средства, чтобы проквантовать это выражение для энергии, что делается совершенно аналогично правилам §§ 11, 13 и не нуждается в дальнейшем обсуждении. Целесообразно, далее, провести разложение поля поляризации \mathbf{P} и электронного волнового поля по плоским волнам. Учитывая, что \mathbf{P} содержит только плоские волны, получаем обобщение (10.13):

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}') = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma\omega}} \frac{\mathbf{w}}{w} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}'} (b_{\mathbf{w}} - b_{-\mathbf{w}}^+). \quad (29.23)$$

Если подставить это выражение в (29.22), то оператор Гамильтона примет вид

$$H = \int \psi^+(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right\} \psi(\mathbf{x}) d^3x + \sum_{\mathbf{w}} \hbar\omega b_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} + \\ + \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \left\{ 4\pi i \left(\frac{e^2 \hbar}{2\gamma\omega V} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{w}} \frac{1}{w} (b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}} - b_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}}) \right\} d^3x, \quad (29.24)$$

где уже проведено интегрирование по \mathbf{x}' . При этом интегрировании следует применить некоторые хитрости, однако, поскольку это не дает читателю никакой новой информации о квантово-полевой теории, мы не будем их обсуждать. Если еще разложить

электронные волновые функции в ряд

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (29.25)$$

и использовать это разложение в (29.24), то исходный оператор Гамильтона (29.22) принимает окончательный вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar \omega b_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} + \underbrace{+ \hbar \sum_{\mathbf{w}, \mathbf{k}} (g_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} + g_{\mathbf{w}}^* b_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}})}_{=H_{Bz}}. \quad (29.26)$$

Константы связи $g_{\mathbf{w}}$ имеют следующий явный вид:

$$\hbar g_{\mathbf{w}} = -4\pi i \left(\frac{e^2 \hbar}{2\gamma \omega V} \right)^{1/2} \frac{1}{w}, \quad (29.27)$$

где γ определена в (29.18). Чтобы перейти от (29.24) к (29.26), было проведено интегрирование по \mathbf{x} . Поскольку, однако, в этом интегрировании согласно (29.24) и (29.25) участвуют только плоские волны, то оно проводится очень просто и может быть выполнено самим читателем.

б) Металлы. И в этом случае наш замысел состоит в описании как электронов, так и колебаний решетки в рамках континуальной модели. Электронный оператор можно сразу позаимствовать из предыдущего изложения в виде (29.19).

Поляризационные колебания, однако, чтобы не было противоречия с экспериментальными данными, следует рассматривать несколько по-иному. В то время как в предыдущем изложении нами использовалась модель, согласно которой частота поляризационных колебаний не зависит от волнового вектора, что хорошо согласуется с экспериментальными данными для полярных кристаллов, в металлах прежде всего речь идет о взаимодействии между электронами и акустическими колебаниями решетки, для которых имеет место закон дисперсии $\omega = vk$, где v — скорость звука. Этот закон уже был введен в § 11 для континуальной модели, причем потенциальная энергия была пропорциональна не P^2 , а $\sum_{j=1}^3 (\text{grad } P_j)^2$ (см. (11.32), а также (11.35)). Представим поэтому энергию колебаний решетки в виде

$$E_P = \int \left\{ \frac{\gamma}{2} \dot{\mathbf{P}}^2(\mathbf{x}) + \frac{g}{2} ((\text{grad } P_x)^2 + (\text{grad } P_y)^2 + (\text{grad } P_z)^2) \right\} d^3x, \quad (29.28)$$

где величины γ и g еще подлежат определению и могут быть

подогнаны под экспериментальные результаты. При введении электрон-решеточного взаимодействия также следует быть осторожным, поскольку электроны в металле смещаются свободно и, следовательно, сильно экранируют поле, вызванное каким-либо точечным зарядом. Можно показать, что из-за этой экранировки вместо обычного кулоновского потенциала возникает другой закон

$$K(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = C_0 \frac{e^{-\lambda|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (29.29)$$

где λ — так называемая постоянная экранировки. Поэтому в нашем предыдущем выражении для энергии взаимодействия (29.21) кулоновский потенциал $e/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ следует заменить на (29.29), после чего получится следующее выражение для энергии взаимодействия:

$$E_{\text{вз}} = \int \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) K(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (-\text{div } \mathbf{P}(\mathbf{x}')) d^3x d^3x'. \quad (29.30)$$

Если предположить, что экранировка очень сильная, то выражение (29.29) при $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$ дает практически нуль, а при $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ — бесконечно большой вклад. При подходящем предельном переходе для λ и C_0 выражение для K принимает вид δ -функции. Так как явное проведение такого предельного перехода ничего не дает для понимания существа дела, то мы опустим его и в дальнейшем будем считать, что K имеет вид

$$K(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = C \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \text{где } C = e \frac{4\pi}{\lambda^2}. \quad (29.31)$$

С помощью (29.31) выражение для взаимодействия (29.30) существенно упрощается, так как теперь интегрирование по \mathbf{x}' совершенно выпадает. Если вновь вместо $\dot{\mathbf{P}}$ ввести канонически сопряженный импульс $\mathbf{\Pi}$, то, как легко видеть, полный оператор Гамильтона принимает вид

$$\begin{aligned} H = \int \psi^+(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right) \psi(\mathbf{x}) d^3x + \\ + \frac{1}{2} \int \left\{ \frac{\mathbf{\Pi}^2(\mathbf{x})}{\gamma} + g \sum_{j=x,y,z} (\text{grad } \mathbf{P}_j)^2 \right\} d^3x + \\ + C \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) (-\text{div } \mathbf{P}(\mathbf{x})) d^3x. \end{aligned} \quad (29.32)$$

Также и здесь следует отметить, что поляризация опять-таки обязана своим происхождением продольным колебаниям, поэтому для \mathbf{P} снова можно использовать подстановку

$$\mathbf{P} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma\omega_{\mathbf{w}}}} \frac{\mathbf{w}}{w} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} (b_{\mathbf{w}} - b_{-\mathbf{w}}^+), \quad (29.33)$$

причем следует принять во внимание, что теперь частоты ω за-

висят от \mathbf{w} . Подстановка (29.33) и (29.25) в (29.32) дает, после проведения элементарных преобразований, совершенно аналогичный (29.26) оператор Гамильтона, где лишь константы связи $g_{\mathbf{w}}$ имеют другое значение и в явном виде могут быть представлены следующим образом:

$$\hbar g_{\mathbf{w}} = -\frac{4\pi e i}{\lambda^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma V \omega_{\mathbf{w}}}} w. \quad (29.34)$$

Для теории сверхпроводимости окажется очень важным то обстоятельство, что константы связи $g_{\mathbf{w}}$, которые пропорциональны $1/\sqrt{\gamma}$, тем самым также пропорциональны $1/\sqrt{M}$, где M — масса иона решетки.

§ 30. Нестационарная теория возмущений (первый порядок). Спонтанное и индуцированное испускание и поглощение фононов. Представление с помощью диаграмм Фейнмана

В § 29 был введен оператор Гамильтона для взаимодействия между электронами и колебаниями решетки. Хотя этот гамильтониан выглядит еще довольно просто, выяснилось, что соответствующее ему уравнение Шредингера не может быть решено точно. Поэтому, чтобы получить представление о том, как проявляется взаимодействие между колебаниями решетки и электронами, мы вынуждены обратиться к развитию соответствующих приближенных методов. Вначале кажется естественным воспользоваться теорией возмущений, в которой предполагается, что энергия взаимодействия очень мала. Соответственно этому представим оператор Гамильтона, как обычно, в виде суммы

$$H = H_0 + H_{\text{вз}}, \quad (30.1)$$

где H_0 относится к невозмущенной задаче, а $H_{\text{вз}}$ рассматривается как малое возмущение. Решения уравнения Шредингера с невозмущенным гамильтонианом

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar \omega_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^{\dagger} b_{\mathbf{w}} \quad (30.2)$$

могут быть легко найдены (см. упражнение 1 § 15). Различные \mathbf{k} -состояния электронов могут быть, смотря по обстоятельствам, либо заняты электроном, либо свободны. Состояния колебаний решетки с различными волновыми векторами \mathbf{w} могут быть заняты определенным числом фононов. Примерами таких состояний могут быть

$$\Phi(0) = a_{\mathbf{k}_0}^{\dagger} \Phi_0; \quad a_{\mathbf{k}_0}^{\dagger} b_{\mathbf{w}_0}^{\dagger} \Phi_0; \quad \dots; \quad a_{\mathbf{k}_0}^{\dagger} \frac{1}{\sqrt{n!}} (b_{\mathbf{w}_0}^{\dagger})^n \Phi_0. \quad (30.3)$$

Пусть теперь включено взаимодействие, так что функции (30.3) более не являются решениями соответствующего гамильто-

ниану (30.1) уравнения Шредингера. Теперь целесообразно перейти к *представлению взаимодействия* (см. § 16). Тогда соответствующее уравнение Шредингера принимает вид

$$i\hbar\dot{\tilde{\Phi}}(t) = \tilde{H}_{вз}(t)\tilde{\Phi}(t), \quad (30.4)$$

где $\tilde{H}_{вз}$ ниже будет выписан еще раз в явном виде. Положим, что в начальный момент времени $t=0$ существует состояние вида (30.3), так что справедливо соотношение

$$\tilde{\Phi}(0) = \Phi(0), \quad (30.5)$$

поскольку в начальный момент времени $t=0$ представления Шредингера и взаимодействия совпадают. Если (30.4) рассматривать как дифференциальное уравнение по времени, то интегрирование (30.4) сразу дает следующий результат:

$$\tilde{\Phi}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau) \tilde{\Phi}(\tau) d\tau + \tilde{\Phi}(0). \quad (30.6)$$

Естественно, что пока мы еще ничего не выиграли, так как искомая функция $\tilde{\Phi}$ вновь стоит под интегралом в правой части (30.6).

Теперь воспользуемся тем, что возмущение должно быть малым. Тогда искомая функция состояния и после включения возмущения, по меньшей мере в самом начале, изменится очень мало, так что левая часть (30.6) будет лишь незначительно отличаться от $\Phi(0)$. Тогда функцию $\tilde{\Phi}(\tau)$ под интегралом следует заменить на $\Phi(0)$, что ведет к пренебрежению в (30.6) членами второго и более высоких порядков относительно $H_{вз}$. После этого уравнение (30.6) переходит в

$$\tilde{\Phi}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau) d\tau \cdot \Phi(0) + \Phi(0). \quad (30.7)$$

В правой части этого уравнения как функция $\Phi(0)$, так и оператор $\tilde{H}_{вз}$ заданы в явном виде, так что можно вычислить искомую функцию $\tilde{\Phi}(t)$. В этом и состоит теперь наша задача. Для этого зададим явно оператор $H_{вз}$ в представлении взаимодействия. Оператор $H_{вз}$ в представлении взаимодействия (см. (29.26)) точно в тех же обозначениях уже был введен в § 16, однако ради полноты изложения выпишем его еще раз,

$$\tilde{H}_{вз}(\tau) = \hbar \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} \{ g_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{w}} e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})\tau} + g_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^{\dagger} e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})\tau} \}. \quad (30.8)$$

Оператор (30.8) состоит из линейных комбинаций операторов

вида

$$a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{w}} \quad (30.9)$$

и

$$a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+, \quad (30.10)$$

где (30.9) описывает уничтожение, а (30.10), напротив, рождение фонона, причем одновременно уничтожаются электроны в начальном состоянии и рождаются в новом конечном состоянии.

Посмотрим теперь, как действуют эти операторы на начальное состояние, и рассмотрим для этого некоторые типичные

Примеры. 1. Спонтанное испускание фонона. Пусть вначале имеется электрон в состоянии \mathbf{k}_0 , а фононов нет. Тогда начальное состояние задается функцией

$$| \Phi(0) = a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0. \quad (30.11)$$

Если подействовать оператором (30.9) на начальное состояние (30.11), то соответствующее выражение исчезает, так как фонон уничтожается, а в начальном состоянии, по предположению, фононов не было. Если, напротив, подействовать на (30.11) выражением (30.10), затем воспользоваться перестановочными соотношениями для ферми-операторов и тем обстоятельством, что действие оператора уничтожения на Φ_0 дает нуль, то мы получим

$$a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{w}}^+ \Phi_0 \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \mathbf{k}_0}. \quad (30.12)$$

Чтобы получить $\tilde{H}_{вз} a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0$, следует перемножить (30.12) со стоящими в (30.8) экспонентами и $\hbar g_{\mathbf{w}}^*$, а затем просуммировать по \mathbf{k} и \mathbf{w} . Если затем подставить полученный таким образом результат в (30.7), то без каких-либо дальнейших вычислений получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(t) = \\ = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} (-i) g_{\mathbf{w}}^* \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 - \mathbf{w}} \int_0^t e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}} + \mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})\tau} d\tau \cdot a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{w}}^+ \Phi_0 + a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0. \end{aligned} \quad (30.13)$$

Ввиду присутствия в (30.13) символа Кронекера, это выражение переходит в

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(t) = \\ = \sum_{\mathbf{w}} (-i) g_{\mathbf{w}}^* \int_0^t e^{i\epsilon_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}}\tau} e^{i\omega_{\mathbf{w}}\tau} e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}_0}\tau} d\tau \cdot a_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}}^+ \Phi_0 + a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0. \end{aligned} \quad (30.14)$$

Результат (30.14) можно интерпретировать следующим образом. Из начального состояния, в котором имеется электрон с волновым

вектором \mathbf{k}_0 , под влиянием возмущения возникает новое состояние с фононом, волновой вектор которого равен \mathbf{w} , и электроном, который перешел из начального состояния \mathbf{k}_0 в новое состояние $\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}$. Этот процесс можно представить наглядно с помощью диаграммы (или графика).

Здесь и в последующем изложении мы постоянно будем читать эти диаграммы справа налево, что, возможно, потребует некоторого изменения привычки, однако окажется чрезвычайно полезным для формулировки правил вычисления.

Приходящий электрон будем представлять отрезком прямой линии с указывающей влево стрелкой. Затем взаимодействие с колебаниями решетки представим узлом диаграммы (или вершиной от английского «vertex»). Уходящий после взаимодействия электрон вновь представляется прямой линией со стрелкой, а уходящий фотон — волнистой линией со стрелкой (рис. 38). С помощью этих и аналогичных диаграмм, с которыми мы познакомимся позже, можно не только очень наглядно описать происходящие процессы, но — и это как раз основное в применении диаграмм — с помощью диаграммы можно установить точные правила вычисления, позволяющие найти функцию конечного состояния. Для этого запишем функцию конечного состояния в виде

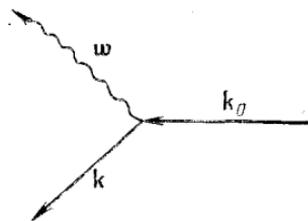


Рис. 38. Спонтанное испускание фотона.

$$\tilde{\Phi}(t) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{w}}^+ \Phi_0 + a_{\mathbf{k}}^+ \Phi_0. \quad (30.15)$$

Задача теории состоит в вычислении коэффициентов $c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}}(t)$. Рецепт вычисления этих коэффициентов следующий:

приходящая электронная волна	$e^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}_0}\tau}$	
уходящая электронная волна	$e^{i\varepsilon_{\mathbf{k}}\tau}$	
выходящая решеточная волна	$e^{i\omega_{\mathbf{w}}\tau}$	
вершина	$-ig_{\mathbf{w}}^*$	

В вершине используется закон сохранения импульса $\hbar\mathbf{k}_0 = \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{w}$ для приходящей и уходящих волн. Стоящие в схеме справа функции следует перемножить и затем проинтегрировать от начального момента времени t_0 (мы постоянно будем полагать $t_0 = 0$) до конечного момента времени t . Этот рецепт позволяет получить следующие выражения для коэффициентов:

$$c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}}(t) = -ig_{\mathbf{w}}^* \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{w}, \mathbf{k}_0} \int_0^t e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0})\tau} d\tau. \quad (30.16)$$

Как показывает сравнение этого выражения с (30.13), это и есть

полученный нами ранее результат. Внимательный читатель установит, что вывести эти правила совсем нетрудно и его задача в других случаях будет постоянно заключаться в том, чтобы самому получить аналогичные правила для каждого данного взаимодействия.

Интегрирование в (30.16) выполняется сразу и в результате получаем

$$|c_{\mathbf{k},\mathbf{w}}(t) = g_{\mathbf{w}}^* \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\mathbf{k}_0} \frac{e^{it\Delta} - 1}{-\Delta}, \quad (30.17)$$

где введено сокращенное обозначение

$$\Delta = \varepsilon_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0}. \quad (30.18)$$

Что же мы получили, вычислив коэффициенты с отдельных функций состояния? Согласно основному правилу квантовой механики, квадрат модуля

$$|c_{\mathbf{k},\mathbf{w}}(t)|^2 \quad (30.19)$$

определяет вероятность того, что система находится в соответствующем состоянии. В нашем случае, следовательно, в состоянии с одним электроном с волновым вектором \mathbf{k} и одним фононом с волновым вектором \mathbf{w} . Дифференцируя (30.19) по времени, найдем вероятность перехода в единицу времени (в секунду), которая, таким образом, дает меру того, с какой скоростью электрон из начального состояния рассеивается в конечное состояние с испусканием фонона. Это выражение имеет вид

$$|W^s = \frac{d}{dt} |c_{\mathbf{k},\mathbf{w}}(t)|^2 = |g_{\mathbf{w}}|^2 \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\mathbf{k}_0} 2 \frac{\sin \Delta t}{\Delta}. \quad (30.20)$$

Функция $\frac{1}{\pi} \frac{\sin \Delta t}{\Delta}$ в предельном случае большого t становится δ -функцией Дирака:

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin \Delta t}{\Delta} = \delta(\Delta). \quad (30.21)$$

Условие, что она отлична от нуля, только когда ее аргумент $\Delta = 0$, представляет, как можно видеть с помощью (30.18), закон сохранения энергии:

$$\text{энергия приходящего электрона} = \text{энергия рассеянного электрона плюс энергия испущенного фонона}. \quad (30.22)$$

Для приложений, как, например, в следующем параграфе, посвященном электропроводности, важно вычислить, с какой вообще вероятностью электрон рассеивается из начального состояния в какое-либо конечное состояние. Согласно основным правилам статистики, вероятность протекания какого-либо процесса равна сумме парциальных вероятностей каждого отдельного процесса.

В данном случае мы получаем, таким образом, для полной вероятности перехода следующее выражение:

$$W_{\text{полн}}^s = \sum_{\mathbf{w}} W_{\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_0 - \mathbf{w}}^s. \quad (30.23)$$

Если подставить сюда (30.20) и (30.21), то получим

$$W_{\text{полн}}^s = \sum_{\mathbf{w}} |g_{\mathbf{w}}|^2 2\pi \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0} + \omega_{\mathbf{w}}). \quad (30.24)$$

δ -функция, естественно, имеет смысл только под интегралом. На этом основании сумму по \mathbf{w} следует заменить интегралом. При этом следует ввести соответствующее правило вычисления волновых векторов \mathbf{w} . Как мы уже видели ранее на примере колебаний сплошной среды, волны решетки, так же как и электронные волны, должны удовлетворять условиям периодичности. Следствием этих условий являются следующие явные выражения для \mathbf{w} :

$$w_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad w_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad w_z = \frac{2\pi}{L} n_z, \quad (30.25)$$

где n_x, n_y, n_z — целые числа, которые ввиду конечности постоянной решетки a кристалла изменяются вплоть до значений $|n_j| = L/(2a)$ (L — линейный размер кристалла).

Сумму по \mathbf{w} , как легко видеть, можно переписать формально следующим образом:

$$\sum_{\mathbf{w}} \equiv \sum_{n_x, n_y, n_z} = \sum \dots dn_x dn_y dn_z, \quad \text{где } dn_j = 1. \quad (30.26)$$

Эта форма записи позволяет немедленно ввести интеграл, если только выразить приращения dn согласно (30.25) через $d\mathbf{w}$. Тогда (30.26) переходит в

$$\left| \sum_{\mathbf{w}} \dots \rightarrow \int \dots \frac{L^3}{(2\pi)^3} d\mathbf{w}_x d\mathbf{w}_y d\mathbf{w}_z = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \dots d^3\mathbf{w}, \quad V = L^3, \quad (30.27) \right.$$

так что $W_{\text{полн}}^s$ окончательно принимает следующий вид:

$$\left| W_{\text{полн}}^s = \frac{V}{(2\pi)^2} \int |g_{\mathbf{w}}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0} + \omega_{\mathbf{w}}) d^3\mathbf{w}. \quad (30.28) \right.$$

Вначале могло бы показаться, что вероятность перехода пропорциональна объему. Однако это не так, поскольку константы связи $g_{\mathbf{w}}$ сами зависят от объема согласно соотношению

$$|g_{\mathbf{w}}|^2 = \frac{1}{V} C_{\mathbf{w}}, \quad (30.29)$$

как это следует из формулы (29.27). $C_{\mathbf{w}}$ представляет собой за-

висящую от \mathbf{w} функцию, различную для металлов и полярных кристаллов (см., например, (29.27), (29.34)).

Окончательный результат вычисления (30.28) определяется, естественно, функциональными зависимостями $\omega_{\mathbf{w}}$ и $C_{\mathbf{w}}$ от \mathbf{w} .

2. Индуцированное испускание и поглощение фононов. Рассмотрим начальное состояние системы $\Phi(0)$, в котором наряду с электроном с волновым вектором \mathbf{k}_0 имеются еще и n фононов с волновыми векторами \mathbf{w}_0 :

$$\left| \Phi(0) = a_{\mathbf{k}_0}^+ \frac{1}{\sqrt{n!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^n \Phi_0. \right. \quad (30.30)$$

Чтобы вычислить с помощью формулы (30.7) новую функцию состояния, следует вновь подействовать на начальное состояние

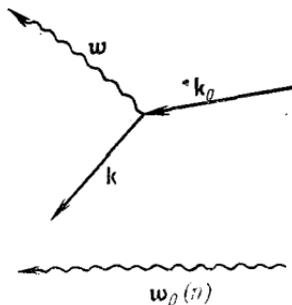


Рис. 39. Спонтанное испускание фонона \mathbf{w} .

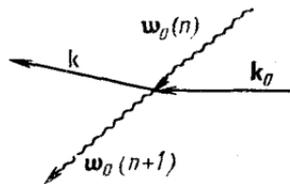


Рис. 40. Индуцированное испускание фонона.

(30.30) оператором взаимодействия $\tilde{H}_{вз}$. При этом учтем, что этот оператор содержит сумму по \mathbf{w} . Здесь могут возникнуть два различных случая, в зависимости от того, совпадает индекс суммирования \mathbf{w} с \mathbf{w}_0 или нет. Если эти волновые числа не равны друг другу, то можно полностью использовать предыдущие соображения, так что в качестве конечного состояния получаем комбинацию функций вида

$$a_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}}^+ \frac{1}{\sqrt{n!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^n \Phi_0, \quad (30.31)$$

поэтому для рассматриваемого процесса полная функция состояния после рассеяния имеет вид

$$\left| \tilde{\Phi}^s(t) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w} \neq \mathbf{w}_0} c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}}^s(t) a_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{w}}^+ \frac{1}{\sqrt{n!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^n \Phi_0. \right. \quad (30.32)$$

Весь процесс можно представить с помощью диаграммы рис. 39. При этом коэффициенты $c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}}^s$ в явном виде задаются выражениями (30.16) и (30.17). Теперь исследуем интересный случай, когда

\mathbf{w} совпадает с \mathbf{w}_0 . Тогда мы придем, как будет видно из последующего изложения, к процессам *индуцированного испускания и поглощения*.

Выделим из $\tilde{H}_{вз}$ (см. (30.8)) тот член, для которого $\mathbf{w} = \mathbf{w}_0$ и рождается дополнительно еще один фотон. Подействуем этой частью взаимодействия на начальное состояние (30.31), умножим на $1/(i\hbar)$ и проинтегрируем. Тогда получим ту часть $\Phi(t)$ (см. (30.7)), которая описывает рождение дополнительно еще одного фотона и рассеяние электрона. Соответствующий член дастся выражением

$$\underbrace{- ig_{\mathbf{w}_0}^* \int_0^t e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{w}_0} - \epsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{w}_0})\tau} d\tau a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k} + \mathbf{w}_0} b_{\mathbf{w}_0}^+ \cdot a_{\mathbf{k}_0}^+}_{(I)} \frac{1}{\sqrt{n!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^n \Phi_0}_{(II)}. \quad (30.33)$$

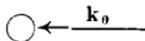
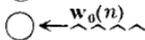
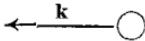
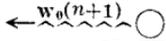
Вычисление части II выражения (30.33) дает, если учесть еще нормировку фотонного состояния, следующий результат:

$$(II) = \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{w}_0, \mathbf{k}_0} \sqrt{n+1} a_{\mathbf{k}}^+ \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^{n+1} \Phi_0. \quad (30.34)$$

Описываемый этим выражением процесс представим с помощью диаграммы рис. 40 и введем далее рецепт вычисления коэффициентов $c^{(e)}(t)$ при соответствующих этому процессу волновых функциях:

$$\tilde{\Phi}^{(e)}(t) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}_0}^{(e)}(t) a_{\mathbf{k}}^+ \frac{1}{\sqrt{(n+1)!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^{n+1} \Phi_0. \quad (30.35)$$

Индекс (e) указывает на то, что в этом процессе речь идет о рождении, т. е. испускании фотона. Линиям и вершине диаграммы рис. 40 поставим в соответствие следующие функции:

приходящая электронная волна	$e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}_0}\tau}$	
n приходящих фотонов	$e^{-in\omega_{\mathbf{w}_0}\tau}$	
уходящая электронная волна	$e^{i\epsilon_{\mathbf{k}}\tau}$	
$(n+1)$ уходящих фотонов	$e^{i(n+1)\omega_{\mathbf{w}_0}\tau}$	
вершина	$(-ig_{\mathbf{w}_0}^*) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 - \mathbf{w}_0} \sqrt{n+1}$	

Эти функции следует перемножить друг с другом и проинтегрировать затем по времени τ от 0 до t . Мы утверждаем, что при этом получается правильное выражение коэффициента

$$c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}_0}^{(e)} = -ig_{\mathbf{w}_0}^* \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 - \mathbf{w}_0} \sqrt{n+1} \int_0^t e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}} + (n+1)\omega_{\mathbf{w}_0} - \epsilon_{\mathbf{k}_0} - n\omega_{\mathbf{w}_0})\tau} d\tau. \quad (30.36)$$

Доказательство проводится легко, если просто использовать во второй части (30.33) выражения (30.34) и сравнить коэффициен-

ты разложения (30.35) с (30.33). С помощью этих коэффициентов сразу же определяется вероятность перехода, которая принимает вид

$$|W_{\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_0 - \mathbf{w}_0}^{(e)}| = |g_{\mathbf{w}_0}|^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 - \mathbf{w}_0} (n+1) 2\pi\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}_0} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0} + \omega_{\mathbf{w}_0}). \quad (30.37)$$

Вначале здесь возникает формальная трудность: так как начальное и конечное состояния определены точно, то нет никакой суммы, тем не менее появляется δ -функция.

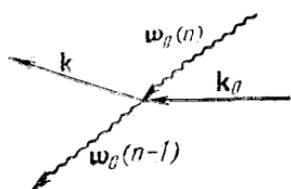


Рис. 41. Поглощение фонона.

Как мы увидим позже, эта трудность устраняется тем, что всегда приходится усреднять по определенному распределению начальных состояний, так что вновь появляется суммирование или интегрирование по определенным \mathbf{k} - или \mathbf{w} -состояниям. Наряду с членом в $H_{вз}$, который описывает испускание фононов, появляется еще один член, который описывает поглощение фонона с волновым вектором \mathbf{w}_0 . Эта часть получается совершенно аналогично полученной выше:

$$-ig_{\mathbf{w}_0} \underbrace{\int_0^t e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}_0} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}_0})\tau} d\tau}_{\text{I}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}_0}^+ a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{w}_0} a_{\mathbf{k}_0}^+ \underbrace{\frac{1}{\sqrt{n!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^n \Phi_0}_{\text{II}}, \quad (30.38)$$

где II с помощью перестановочных соотношений переходит в

$$\text{II} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0} \sqrt{n} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}_0}^+ \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^{n-1} \Phi_0. \quad (30.39)$$

Этому процессу, когда поглощается один фонон, мы поставим в соответствие диаграмму рис. 41. Соответствующая этому процессу функция состояния в общем виде дается выражением

$$\left| \tilde{\Phi}^{(a)}(t) = \sum c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}_0}^{(a)}(t) a_{\mathbf{k}}^+ \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^{n-1} \Phi_0. \quad (30.40) \right.$$

Коэффициенты получаются совершенно так же, как и на стр. 233, с той лишь разницей, что для этого процесса вершине следует приписать множитель

$$-ig_{\mathbf{w}_0} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 + \mathbf{w}_0} \sqrt{n}. \quad (30.41)$$

После интегрирования по времени получаем для коэффициентов следующее выражение:

$$c_{\mathbf{k}, \mathbf{w}_0}^{(a)} = -ig_{\mathbf{w}_0} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 + \mathbf{w}_0} \sqrt{n} \int_0^t e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}_0 + \mathbf{w}_0} + (n-1)\omega_{\mathbf{w}_0} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0} - n\omega_{\mathbf{w}_0})\tau} d\tau, \quad (30.42)$$

согласно которому вероятность перехода имеет вид

$$|W_{\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_0 + \mathbf{w}_0}^{(n)}| = |g_{\mathbf{w}_0}|^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0 + \mathbf{w}_0} n 2\pi \delta(\epsilon_{\mathbf{k}_0 + \mathbf{w}_0} - \epsilon_{\mathbf{k}_0} - \omega_{\mathbf{w}_0}). \quad (30.43)$$

Здесь также отсутствует сумма, которая затем появляется, если в качестве начального состояния выбрать некоторый волновой пакет или распределение состояний (см. § 31).

Резюме. Подытожим кратко наши результаты. В начальный момент времени $t=0$ начальное состояние имело вид

$$|\Phi(0) = a_{\mathbf{k}_0}^+ \frac{1}{\sqrt{n!}} (b_{\mathbf{w}_0}^+)^n \Phi_0. \quad (30.44)$$

Это состояние представляется графически в виде падающего электрона с волновым вектором \mathbf{k}_0 и n фононами с волновыми векторами \mathbf{w}_0 . Под действием оператора возмущения $\tilde{H}_{вз}$ начальное

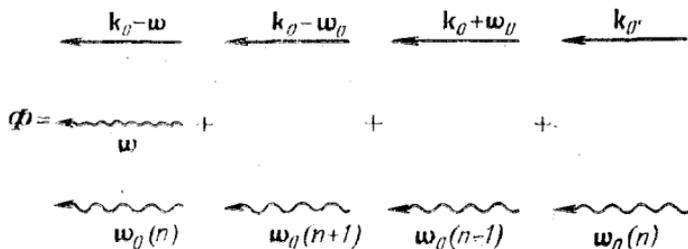


Рис. 42. Наглядное представление функции состояния (30.45).

состояние переходит во все возможные конечные состояния. Конечные состояния можно записать в виде суммы

$$|\tilde{\Phi}(t) = \tilde{\Phi}^{(s)} + \tilde{\Phi}^{(e)} + \tilde{\Phi}^{(a)} + \Phi(t) \quad (30.45)$$

и представить графически (рис. 42). Первое состояние с индексом s описывает спонтанное испускание фононов с $\mathbf{w} \neq \mathbf{w}_0$. Приходящие фононы не испытывают возмущения. Однако рождается один новый фонон с волновым вектором \mathbf{w} . Электрон после соударения оказывается в состоянии $\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}$. Второй член описывает испускание одного нового фонона с \mathbf{w}_0 . Третий член, наконец, описывает поглощение фонона с \mathbf{w}_0 . Явные выражения для отдельных членов (30.45) даются формулами (30.32), (30.35) и (30.40). Соответствующие коэффициенты представлены выражениями (30.17) с (30.18), (30.36) и (30.42). Равным образом приведены соответствующие этим процессам вероятности переходов.

§ 31. Электрическое сопротивление

Теперь мы хотим показать, как с помощью результатов последних параграфов можно явно вычислить электрическое сопротивление полупроводника или металла. При этом нужно привлечь

на помощь соображения, которые, собственно говоря, находятся за пределами квантовополевой теории. Чтобы лучше понять обычный образ действий, полезно представить себе для наглядности, что электроны являются частицами, которые благодаря соударениям с квантами звука (точнее сказать — поглощению и испусканию квантов звука) рассеиваются из начального состояния с импульсом $\hbar\mathbf{k}$ в новое направление распространения с импульсом $\hbar\mathbf{k}'$. Так как эти соударения происходят статистически, то электроны мы будем описывать с помощью функции распределения $f_{\mathbf{k}}$. Эта функция указывает среднее число электронов, находящихся в состоянии \mathbf{k} . Ради простоты рассмотрим одно направление спина, что, вообще говоря, законно, если переходами между различными направлениями спина пренебрегается. Поскольку электроны подчиняются статистике Ферми, то число заполнения одного состояния никогда не может быть больше 1, так что должно выполняться соотношение

$$0 \leq f_{\mathbf{k}} \leq 1. \quad (31.1)$$

Если полное число электронов N , то должно иметь место условие

$$\sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} = N. \quad (31.2)$$

Мы исследуем временное изменение функции распределения, связанное только с соударениями, что пояснено с помощью рис. 43. Если рассмотреть интервал dk в окрестности k , то число заполнения возрастает (штрихованный участок) благодаря соударениям, которые переводят электрон из других состояний в это состояние k . Наоборот, числа заполнения уменьшаются для всех тех соударений, для которых электрон из начального состояния k переводится в другие состояния. Таким образом, в совершенно общем случае изменение f из-за соударений можно представить в виде соотношения

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t}\right)_{\text{соуд}} = \text{скорость «в»} - \text{скорость «из»}. \quad (31.3)$$

Рассмотрим теперь эти скорости более подробно. Скорость перехода из начального состояния k' в рассматриваемое конечное состояние k представляет собой произведение чисел заполнения

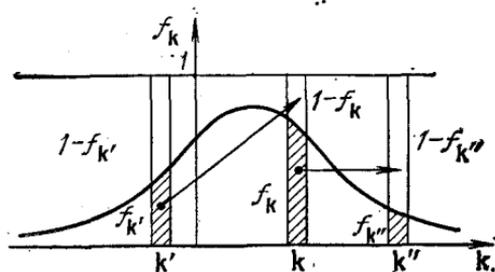


Рис. 43. Изменение функции распределения $f_{\mathbf{k}}$ со временем (только с учетом соударений).

для всех тех соударений, для которых электрон из начального состояния k переводится в другие состояния. Таким образом, в совершенно общем случае изменение f из-за соударений можно представить в виде соотношения

Рассмотрим теперь эти скорости более подробно. Скорость перехода из начального состояния k' в рассматриваемое конечное состояние k представляет собой произведение чисел заполнения

начального состояния $f_{k'}$ на вероятность того, что конечное состояние еще свободно (иначе нарушалась бы ферми-статистика). Далее, результат следует умножить на удельную скорость перехода из заполненного состояния в пустое $W_{k' \rightarrow k}$. Тогда (31.3) принимает следующий явный вид:

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t}\right)_{\text{соуд}} = \sum_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'} (1 - f_{\mathbf{k}}) W_{\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}'}) W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}. \quad (31.4)$$

Если же для чисел заполнения имеет место условие

$$f_{\mathbf{k}} \ll 1, \quad (31.5)$$

то можно воспользоваться приближением

$$(1 - f_{\mathbf{k}}) \approx 1. \quad (31.6)$$

Сделанные здесь предположения довольно часто выполняются в случае полупроводников. Скорости перехода определяются соударениями с фононами или соударениями с дефектами кристаллической решетки. В качестве примера мы рассмотрим фононы. Полная скорость перехода складывается из скоростей перехода поглощения и испускания фононов:

$$\left. \begin{aligned} W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} &= W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}^a + W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}^e, \\ \text{закон сохранения импульса: } \mathbf{k}' &= \mathbf{k} + \mathbf{w}, \mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{w}', \\ \text{волновые векторы фононов: } \mathbf{w} &= \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{w}' = \mathbf{k} - \mathbf{k}', \end{aligned} \right\} \quad (31.7)$$

причем, как указано, закон сохранения импульса должен выполняться в каждом отдельном процессе. В предыдущем параграфе были вычислены вероятности переходов и показано, что они имеют вид

$$W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{w}}^a = 2\pi\hbar |g_{\mathbf{w}}|^2 n_{\mathbf{w}} \delta(E_{\mathbf{k} + \mathbf{w}} - E_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{w}}) \quad (31.8)$$

и

$$W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{w}}^e = 2\pi\hbar |g_{\mathbf{w}}|^2 (n_{\mathbf{w}} + 1) \delta(E_{\mathbf{k} - \mathbf{w}} + \hbar\omega_{\mathbf{w}} - E_{\mathbf{k}}). \quad (31.9)$$

Как теперь видно, δ -функции более не являются опасными для решения, так как их следует подставить в правые части (31.4) под знаки сумм, а суммы, естественно, сразу могут быть преобразованы в интегралы. Для дальнейшего рассмотрения выражения (31.4) сделаем типичное приближение. В (31.8) и (31.9) входят числа заполнения $n_{\mathbf{w}}$. Если говорить точно, то теперь следовало бы получить уравнения, описывающие изменения чисел заполнения фононов. Однако мы предположим, что фононы образуют (в термодинамическом смысле) тепловой резервуар, который поддерживается при определенной температуре T . Как показано в термодинамике (чего мы также не будем здесь выводить), среднее число заполнения при тепловом равновесии для

бозе-частиц, каковыми являются фононы, дается следующим выражением:

$$\bar{n}_w = \frac{1}{e^{\hbar\omega_w/k_B T} - 1}. \quad (31.10)$$

Здесь k_B — постоянная Больцмана. В последующем изложении мы примем, что соотношение (31.10) остается справедливым и в том случае, когда электроны выведены из равновесного состояния внешним электрическим полем. Однако вначале исследуем случай теплового равновесия в отсутствие внешнего поля. Для имеющего теперь место равновесного распределения должно выполняться соотношение

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial t_{\pm}} \right)_{\text{соуд}} = 0. \quad (31.11)$$

Это соотношение следует понимать так. В левую часть (31.11) в качестве явного выражения следует подставить правую часть (31.4), в результате чего получается уравнение для $f_{\mathbf{k}}^0$. Как можно показать, соотношение (31.11) удовлетворяется функцией распределения

$$f_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \zeta)} + 1} \equiv f^0(E_{\mathbf{k}}). \quad (31.12)$$

Здесь использовано сокращенное обозначение

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (31.13)$$

ζ — так называемый химический потенциал. Химический потенциал должен быть определен таким образом, чтобы удовлетворялось соотношение (31.2). На рис. 44 показан ход кривой $f_{\mathbf{k}}^0$ при $T=0$ и $T>0$ в случае металла. Очевидно, что $f_{\mathbf{k}}^0$ является функцией только энергии E . Теперь наложим внешнее электрическое поле и исследуем вызванные этим изменения функции распределения $f_{\mathbf{k}}^0$. Импульс электрона под действием внешнего поля \mathbf{F} изменяется согласно соотношению

$$\hbar \Delta \mathbf{k} = e \mathbf{F} \Delta t. \quad (31.14)$$

Следствием этого является сдвиг всей функции распределения как целого, как это показано на рис. 44а. Функция распределения в последующий момент времени $t + \Delta t$ следующим образом связана с функцией распределения в предыдущий момент времени:

$$f_{\mathbf{k}}(t + \Delta t) = f_{\mathbf{k} - \Delta \mathbf{k}}(t). \quad (31.15)$$

Если разложить обе стороны в (31.15) по Δt (и перейти к пределу $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \dots$), то получится следующее уравнение:

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t}\right)_{\text{поле}} = -\frac{eF}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}. \quad (31.16)$$

Если теперь предположить, что на электроны одновременно действуют как фононы, так и внешнее поле, то полное измене-

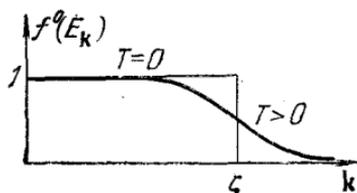


Рис. 44. Общий вид функции распределения f^0 для металла.

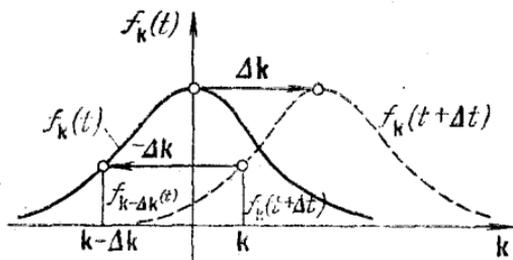


Рис. 44а. Изменение функции распределения $f_{\mathbf{k}}$ со временем только под действием внешнего поля. Соотношение (31.15) непосредственно очевидно из рисунка.

ние функции распределения складывается из обеих соответствующих частей. В стационарном состоянии, таким образом, должно выполняться уравнение

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{поле}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{фоуд}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{поле}} = 0. \quad (31.17)$$

Это так называемое уравнение Больцмана. Решение этого уравнения чрезвычайно сложно, так что для обстоятельного рассмотрения следует обратиться к специальной литературе. Здесь же для выявления важнейших моментов мы дадим только краткое описание решения. Мы полагаем поле настолько малым, что распределение возмущается лишь незначительно, так что $f_{\mathbf{k}}$ можно представить в виде

$$f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^0 + f_{\mathbf{k}}^1 \quad (31.18)$$

и предположить, что

$$|f_{\mathbf{k}}^1| \ll f_{\mathbf{k}}^0. \quad (31.19)$$

При малых полях можно ограничиться линейным по полю членом, что немедленно приводит к возможности использования

приближения

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t}\right)_{\text{поле}} \approx -\frac{eF}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^0. \quad (31.20)$$

Так как функция равновесного распределения $f_{\mathbf{k}}^0$ удовлетворяет уравнению (31.11), то сразу после использования разложения (31.18) получаем

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t}\right)_{\text{соуд}} = \left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^1}{\partial t}\right)_{\text{соуд}}. \quad (31.21)$$

Под правой частью (31.21) следует вновь подразумевать явное выражение (31.4), которое, очевидно, чрезвычайно сложно. В ряде случаев (31.21) можно, однако, упростить с помощью введения так называемого времени соударения τ . А именно, мы будем считать, что под действием соударений возмущение $f_{\mathbf{k}}^1$ равновесной функции распределения через время τ затухает, так что справедливо соотношение

$$\left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^1}{\partial t}\right)_{\text{соуд}} = -\frac{1}{\tau} f_{\mathbf{k}}^1. \quad (31.22)$$

Приведем пример, в котором это предположение простым образом оправдывается. С помощью (31.18) и (31.19) и после кратких преобразований (31.21) принимает вид

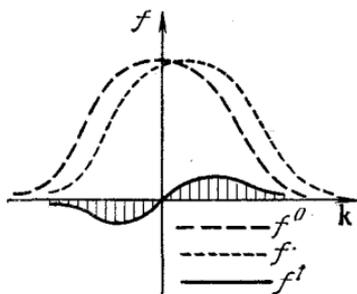


Рис. 45. Функции распределения.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^1}{\partial t}\right)_{\text{соуд}} &= \sum_{\mathbf{k}'} \underbrace{f_{\mathbf{k}'}^1 W_{\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}}}_{\approx 0} - \\ &= -f_{\mathbf{k}}^1 \underbrace{\sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}}_{=f_{\mathbf{k}}^1 \frac{1}{\tau}}. \end{aligned} \quad (31.23)$$

На рис. 45 представлена разность возмущенной и невозмущенной функций распределения, т. е. как раз $f_{\mathbf{k}}^1$, причем мы имеем в виду случай полупроводника, так что можно считать, что заполнение меняется очень медленно и на величину, гораздо меньшую 1. Очевидно, что функция $f_{\mathbf{k}}^1$ практически в одинаковой мере принимает как положительные, так и отрицательные значения. Предположим, кроме того, что вероятность перехода W меняется медленно, тогда первая сумма в (31.23), как указано, обращается в нуль. Вторая часть это-

го выражения уже имеет вид (31.22), причем время соударения определяется следующим образом

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}. \quad (31.24)$$

Время соударения принимает теперь весьма наглядный смысл: обратная ему величина является просто суммой вероятностей того, что электрон будет рассеян из начального состояния. Если подставить (31.20) и (31.22) в (31.17), то получим

$$f_{\mathbf{k}}^1 = -\tau \frac{e\mathbf{F}}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^0. \quad (31.25)$$

Если учесть теперь, что $f_{\mathbf{k}}^0$ зависит от \mathbf{k} только через энергию, то получим

$$f_{\mathbf{k}}^1 = -e\mathbf{F}\mathbf{v}_{\mathbf{k}}\tau \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial E}. \quad (31.26)$$

Здесь было использовано соотношение

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\mathbf{k}} E. \quad (31.27)$$

Используя эти результаты, можно сразу же вычислить ток и тем самым проводимость. Полный ток складывается из токов $e\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ отдельных электронов, причем состояния заняты согласно функции распределения $f_{\mathbf{k}}$. Так как в состоянии равновесия ток отсутствует, то получаем соотношение

$$\mathbf{j} = e \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} d^3k = e \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^1 d^3k. \quad (31.28)$$

Если сюда подставить $f_{\mathbf{k}}^1$ согласно (31.25), то мы получим линейное соотношение между током и электрическим полем следующего вида:

$$j_{\lambda} = \sum_{\mu} \sigma_{\lambda\mu} F_{\mu}, \quad \begin{array}{l} \lambda = x, y, z, \\ \mu = x, y, z, \end{array} \quad (31.29)$$

где тензор проводимости $\sigma_{\lambda\mu}$ определяется следующим образом:

$$\sigma_{\lambda\mu} = -e^2\tau \int \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial E} v_{\mathbf{k},\lambda} v_{\mathbf{k},\mu} d^3k. \quad (31.30)$$

Если E зависит только от абсолютной величины k , то выражение (31.30) в силу (31.27) дает скалярную проводимость σ , т. е. имеет место закон Ома $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{F}$.

Обсудим теперь качественно, какой вид имеет проводимость σ в случае металла. При этом сначала мы не будем использовать время соударения τ . Поэтому заменим соотношение (31.26)

общим соотношением

$$f_{\mathbf{k}}^1 = -e\mathbf{F} \cdot \Lambda_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial E}, \quad (31.31)$$

где $\Lambda_{\mathbf{k}}$ является некоторой, еще неизвестной функцией \mathbf{k} , которая, однако, в любом случае не зависит от поля, так как мы рассматриваем только малые напряженности полей. Если теперь сопоставить (31.31) с выражением (31.26), то мы получим соотношение

$$\Lambda_{\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \tau, \quad (31.32)$$

откуда следует, что $\Lambda_{\mathbf{k}}$ представляет собой произведение скорости на время соударения и имеет, следовательно, смысл *средней длины пробега*.

Теперь обсудим качественно зависимость проводимости от температуры. Для этого следующим образом упростим (31.8) и (31.9): будем полагать, что наибольший вклад в сопротивление дают волны w , для которых выполняется условие $|n_w| \gg 1$, так что можно положить $(n_w + 1) \approx n_w$. Далее, энергия кванта звука $\hbar\omega_w$ значительно меньше энергии электрона вблизи ферми-поверхности, где разыгрываются процессы рассеяния, так что $E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} \pm \hbar\omega_w \approx E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}$.

Наконец положим, что константы связи $|g_w|^2$ изотропны, т. е. равны просто $|g_w|^2$. Тогда получаем

$$W_{\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}} \approx W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} \sim \bar{n}_w |g_w|^2 \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}), \quad (31.33)$$

где имеет место $w = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$. (31.34)

Если подставить (31.31) и (31.33) в (31.17), учитывая при этом (31.23), то получим

$$\sum_{\mathbf{k}'} |g_w|^2 \bar{n}_w (\Lambda_{\mathbf{k}} - \Lambda_{\mathbf{k}'}) \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \sim \mathbf{v}_{\mathbf{k}}. \quad (31.35)$$

Здесь мы уже поделили на все общие множители, что, вообще говоря, требует некоторого размышления. Пусть теперь в (31.35) \mathbf{k}' заменено на $\mathbf{k} + \mathbf{w}$, а $(\Lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \Lambda_{\mathbf{k}})$ разложена по степеням w . Запишем это разложение в компонентах ($\mu = x, y, z$):

$$(\Lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{w}})_{\mu} - (\Lambda_{\mathbf{k}})_{\mu} = \sum_{\lambda} \frac{\partial (\Lambda)_{\mu}}{\partial k_{\lambda}} w_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda \kappa} \frac{\partial^2 (\Lambda)_{\mu}}{\partial k_{\lambda} \partial k_{\kappa}} w_{\lambda} w_{\kappa}. \quad (31.36)$$

Для дальнейшего обсуждения предположим, что система координат \mathbf{k} расположена так, что \mathbf{k} направлен вдоль оси z . Поскольку должен выполняться закон сохранения энергии, то соударения происходят на ферми-поверхности, т. е. практически горизонтально. Наряду с проекцией $+w_x$ в (31.34) также часто присут-

ствует и $-w_x$ (то же самое верно и для $+w_y, -w_y$), и поскольку $w_x \approx 0$, то линейные по w_x члены в (31.36) не дают никакого вклада в (31.35), а последний член принимает вид

$$\frac{1}{2} \sum \frac{\partial^2 (\Lambda)_\mu}{\partial k_\lambda^2} w_\lambda^2 \quad (31.37)$$

(рис. 46). Исходя из сравнения этого выражения с (31.32), сделаем предположение, что Λ_k параллельно k : $\Lambda_k = kY(k)$, где Y зависит только от абсолютной величины k . Это приближение в случае изотропной задачи может быть строго обосновано. Элементарное дифференцирование приводит к результату, что (31.37) $\sim kw^2 \sim \Lambda_k w^2$, откуда окончательно получаем

$$\Lambda_k - \Lambda_{k+w} \sim \Lambda_k w^2. \quad (31.38)$$

Если подставить это приближение в (31.35) и преобразовать сумму в интеграл (с учетом δ -функции), то получится следующий результат:

$$\Lambda_k \int_0^{w_m} |g_w|^2 w^2 \bar{n}_w w dw \sim v_k, \quad (31.39)$$

$$w_m = w_{\max}.$$

Сравнивая (31.27), (31.28) и (31.30), мы обнаружим, что проводимость σ прямо пропорциональна функции Λ_k . Поэтому мы обсудим получающуюся согласно (31.39) температурную зависимость Λ_k . Так как в конкретной ситуации скорость v_k является заданной величиной, то правая часть (31.39) не зависит от температуры, а левая, напротив, зависит от температуры через функцию распределения n_w :

$$\bar{n}_w = \frac{1}{e^{\hbar\omega_w/k_B T} - 1}. \quad (31.40)$$

Для высоких температур имеет место соотношение

$$\bar{n}_w \sim k_B T / \hbar\omega_w. \quad (31.41)$$

Множитель $k_B T$ можно вынести за знак интеграла, который теперь больше не зависит от температуры, после чего непосредственно получаем следующее справедливое при высоких температурах соотношение:

$$\sigma \sim |\Lambda_k| \sim T^{-1}, \quad (31.42)$$

не зависящее от вида функциональной зависимости $|g_w|^2$ от w .

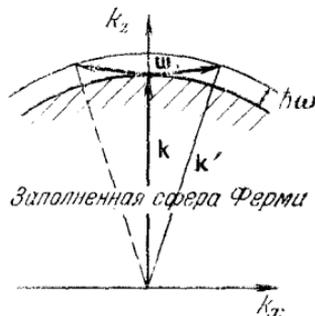


Рис. 46. Рассеяние электронов вблизи поверхности Ферми.

Если же, наоборот, T мала, то мы должны учесть, что наибольший вклад дают фононы малых энергий (т. е. с малыми волновыми векторами). Тогда возможны только такие распределения, для которых функциональная зависимость принимает вид

$$\bar{n}_w = \bar{n}_w \left(\frac{w}{T} \right). \quad (31.43)$$

Далее, поскольку, как уже было отмечено, важны только фононы с малыми волновыми числами, то верхний предел интеграла в (31.39) можно устремить к бесконечности. Делая замену переменной ($w/T \rightarrow w'$), можно сразу же найти температурную зависимость интеграла

$$\int_0^{\infty} |g_w|^2 w^3 \bar{n}_w \left(\frac{w}{T} \right) dw. \quad (31.44)$$

Если, например, $|g_w|^2 \sim w$ (металлы!; см. (29.34)), то мы получаем, что (31.44) $\sim T^5$. Подставляя это выражение в (31.35), находим температурную зависимость проводимости

$$\sigma \sim |\Lambda_{\mathbf{k}}| \sim T^{-5}. \quad (31.45)$$

Такая температурная зависимость действительно имеет место в простых металлах.

§ 32. Нестационарная теория возмущений (второй порядок): собственная энергия, перенормировка массы

Этот параграф является продолжением § 30, в котором была рассмотрена нестационарная теория возмущений в первом порядке. Как мы видели, уравнение Шредингера можно формально проинтегрировать, что приводит к уравнению

$$\tilde{\Phi}(t) = \tilde{\Phi}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{\text{вз}}(\tau) \tilde{\Phi}(\tau) d\tau. \quad (32.1)$$

Здесь функция состояния $\tilde{\Phi}$ и гамильтониан взаимодействия взяты в представлении взаимодействия. Так как интегральное уравнение (32.1) так же трудно решить, как и уравнение Шредингера, мы попытались решить его приближенно, подставив в правую часть под интеграл вместо $\tilde{\Phi}(\tau)$ начальное состояние $\tilde{\Phi}(0)$. Эта подстановка привела к улучшенной функции состояния, которая определяется выражением

$$\tilde{\Phi}^{(1)}(t) = \tilde{\Phi}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{\text{вз}}(\tau) \tilde{\Phi}(0) d\tau. \quad (32.2)$$

Эту процедуру можно продолжить, подставляя под интеграл в

(32.1) на место функции состояния $\tilde{\Phi}(\tau)$ теперь уже не начальное состояние $\tilde{\Phi}(0)$, а улучшенную функцию состояния $\tilde{\Phi}^{(1)}(\tau)$. В результате мы получили еще более точную функцию состояния $\tilde{\Phi}^{(2)}$:

$$\tilde{\Phi}^{(2)}(t) = \tilde{\Phi}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau) \tilde{\Phi}^{(1)}(\tau) d\tau. \quad (32.3)$$

Если в правую часть (32.3) подставить явный вид функции $\tilde{\Phi}^{(1)}$, то получим явное выражение для функции $\tilde{\Phi}^{(2)}$:

$$\left| \begin{aligned} \tilde{\Phi}^{(2)}(t) = \tilde{\Phi}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t d\tau_1 \tilde{H}_{вз}(\tau_1) \tilde{\Phi}(0) + \\ + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \tilde{H}_{вз}(\tau_2) \tilde{H}_{вз}(\tau_1) \tilde{\Phi}(0), \end{aligned} \right. \quad (32.4)$$

явное в том смысле, что в правой части следует подействовать стоящими там операторами на начальное состояние, а затем вычислить получившиеся интегралы. Это вычисление мы проведем на примерах, снова выбрав в качестве оператора Гамильтона $\tilde{H}_{вз}$ оператор взаимодействия между электронами и колебаниями решетки. Этот гамильтониан, как мы видели в предыдущей главе, имеет следующий вид:

$$\left| \begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \tilde{H}_{вз}(\tau) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} \underbrace{(-ig_{\mathbf{w}})}_{\text{поглощение фононов}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{w}} e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})\tau} + \\ + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} \underbrace{(-ig_{\mathbf{w}}^*)}_{\text{испускание фононов}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})\tau}. \end{aligned} \right. \quad (32.5)$$

Тогда же мы обнаружили, что каждому члену можно поставить в соответствие определенный процесс, как это указано в формуле (32.5). Рассмотрим функцию состояния (32.4) более обстоятельно. Первые два ее члена уже встречались нам в предыдущем параграфе, так что теперь нужно исследовать лишь последний член. В этом члене следует дважды последовательно подействовать оператором $\tilde{H}_{вз}$ на начальное состояние. В качестве начального состояния выберем

$$\left| \Phi(0) = a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0. \right. \quad (32.6)$$

Если подействовать оператором $\tilde{H}_{вз}(\tau_1)$ вначале на (32.6), то, как нам известно из § 30, отличный от нуля вклад дает только член

вида

$$b_w^+ a_{k-w}^+ a_k | a_{k_0}^+ \Phi_0 = a_{k_0-w}^+ b_w^+ \Phi_0 \delta_{k, k_0}. \quad (32.7)$$

Следовательно, возникает процесс, представленный на рис. 38. Если теперь подействовать еще раз оператором $\tilde{H}_{вз}$ в момент времени τ_2 , то мы получим два процесса, а именно: либо повторное испускание фонона, либо поглощение уже имеющегося фонона с волновым вектором w (рис. 47). В качестве примера мы обсудим процесс поглощения фонона. Для этого следует, учитывая результат (32.7), вычислить выражение

$$b_w a_{k+w}^+ a_k | a_{k_0-w}^+ b_w^+ \Phi_0, \quad (32.8)$$

где в качестве конечного состояния принимается $a_{k_0}^+ \Phi_0$, т. е. точно начальное состояние. Последовательное включение операторов взаимодействия в моменты времени τ_1 и τ_2 можно, очевидно, представить с помощью диаграммы рис. 47.

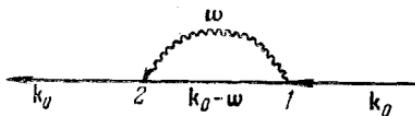


Рис. 47. Собственно-энергетическая часть диаграммы: виртуальное испускание фонона.

Теперь мы рассмотрим обстоятельно ту часть (32.4), которая вновь приводит (после только испускания и поглощения) к начальному состоянию

ко что упомянутых процессов

$$| \tilde{\Phi}(t) = c_{k_0}(t) a_{k_0}^+ \Phi_0 + a_{k_0}^+ \Phi_0. \quad (32.9)$$

Наша задача состоит в явном вычислении коэффициентов $c_{k_0}(t)$. Для этого в конечном итоге следует учесть, что вершины возникают при действии операторов взаимодействия (32.5). Числовой множитель оператора, который представлен выражением (32.7), имеет вид

$$(-ig_w^*) \delta_{k+w, k_0} \int_0^{\tau_2} e^{i(\varepsilon_{k_0-w} + \omega_w - \varepsilon_{k_0})\tau_1} d\tau_1, \quad (32.10)$$

причем здесь учтено, что согласно (32.5) должно быть проведено интегрирование по τ_1 от 0 до τ_2 . Далее нужно учесть, что согласно (32.5) следует еще провести суммирование по k и w . В вершине 2 появляется множитель, который стоял в выражении (32.8) (первое выражение) для оператора взаимодействия $\tilde{H}_{вз}$. Учитывая (32.8), получим для вершины 2 выражение

$$\sum_{k'} (-ig_w) \delta_{k', k_0-w} \int_0^t d\tau_2 e^{i(\varepsilon_{k_0-w} - \omega_w - \varepsilon_{k_0-w})\tau_2}. \quad (32.11)$$

Здесь w то же самое, что и в формуле (32.10). Нам следует еще,

однако, провести суммирование по k' . Если собрать (32.10) и (32.11) вместе, то мы получим следующее явное представление коэффициентов $c_{k_0}(t)$:

$$c_{k_0}(t) = \int_0^t d\tau_2 e^{i\varepsilon_{k_0}\tau_2} \times \\ \times \sum_w (-ig_w) \int_0^{\tau_2} e^{-i(\omega_w + \varepsilon_{k_0-w})(\tau_2-\tau_1)} (-ig_w^*) e^{-i\varepsilon_{k_0}\tau_1} d\tau_1. \quad (32.12)$$

Результат нашего расчета снова можно представить в виде рецепта, соответствующего диаграмме рис. 47:

приходящий свободный электрон	$e^{-i\varepsilon_{k_0}\tau_1}$
вершина 1 — испускание фона	$(-ig_w^*) \delta_{k+w, k_0}$
распространение электрона	
и фона от τ_1 до τ_2	$e^{-i(\omega_w + \varepsilon_{k_0-w})(\tau_2-\tau_1)}$
вершина 2 — поглощение фона	$(-ig_w) \delta_{k'-w, k}$
уходящий свободный электрон	$e^{i\varepsilon_{k_0}\tau_2}$

Затем (32.12) следует проинтегрировать по временам τ_1 и τ_2 при $0 \leq \tau_1 \leq \tau_2 \leq t$ и ввести суммы по w , k , k' . Ввиду присутствия в вершинах символов Кронекера, которые представляют закон сохранения импульса, суммы по k и k' можно опустить, как это сделано в (32.12). Читатель обнаружит, что это просто последовательное развитие приемов, которые уже встречались нам в предыдущем параграфе, посвященном первому порядку нестационарной теории возмущений. Теперь нетрудно представить себе, как будут выглядеть эти приемы для еще более сложных процессов. С примером такого процесса мы познакомимся в следующем параграфе.

Проведя интегрирование по τ_1 и перемножив между собой экспоненциальные функции, получим

$$c_{k_0}(t) = \sum_w |g_w|^2 \int_0^t \frac{1 - e^{i(\varepsilon_{k_0} - \varepsilon_{k_0-w} - \omega_w)\tau_2}}{i(\varepsilon_{k_0} - \varepsilon_{k_0-w} - \omega_w)} d\tau_2. \quad (32.13)$$

Стоящая под интегралом единица после интегрирования приводит к члену, пропорциональному t , а экспоненциальные функции дают по существу осциллирующий член. Для достаточно больших времен член, пропорциональный t , становится преобладающим, так что осциллирующим членом можно пренебречь. Тогда это выражение принимает вид

$$c_{k_0}(t) = -it\Delta\varepsilon_{k_0}, \quad (32.14)$$

где введено сокращенное обозначение

$$\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0} = \sum_{\mathbf{w}} \frac{|g_{\mathbf{w}}|^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}_0} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0 - \mathbf{w}} - \omega_{\mathbf{w}}}. \quad (32.15)$$

Используя этот результат, приводим искомую функцию состояния (32.9) к виду

$$\tilde{\Phi}(t) = (1 - i\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0}t) a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0. \quad (32.16)$$

Это в высшей степени примечательный результат. Он утверждает, что в исследуемом нами процессе испускания и последующего поглощения фонона исходная функция состояния не изменяется, коэффициент же при ней растет пропорционально времени. К разумному результату мы придем только после того, как учтем высшие порядки теории возмущений. Этим мы займемся в § 33, а здесь воспользуемся полученным там результатом. Согласно проведенному в § 33 анализу оказывается, что $1 - i\Delta\varepsilon t$ представляет собой первые два члена разложения экспоненты, так что функцию состояния (32.16) можно записать в виде

$$\tilde{\Phi}(t) = e^{-i\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0}t} a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0. \quad (32.17)$$

Предположим заранее справедливость выражения (32.17) и посмотрим, что означает появление нового временного множителя в (32.17).

Для этого вернемся от представления взаимодействия (функция состояния $\tilde{\Phi}(t)$) к представлению Шредингера (функция состояния $\Phi(t)$). Согласно результатам § 16, $\Phi(t)$ и $\tilde{\Phi}(t)$ связаны через невозмущенный оператор Гамильтона H_0 :

$$\Phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \tilde{\Phi}(t). \quad (32.18)$$

Подставим сюда для $\tilde{\Phi}(t)$ ее выражение (32.17) и сделаем преобразования:

$$\Phi(t) = e^{-i\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0}t} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} a_{\mathbf{k}_0}^+ e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}}_{\text{I}} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}}_{\text{II}} \Phi_0. \quad (32.19)$$

Согласно результатам § 16 получаем

$$\text{I} = a_{\mathbf{k}_0}^+ e^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}_0}t}, \quad \text{II} = \Phi_0,$$

так что

$$\Phi(t) = e^{-i\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0}t - i\varepsilon_{\mathbf{k}_0}t} a_{\mathbf{k}_0}^+ \Phi_0. \quad (32.20)$$

Сравнивая этот результат со стационарным решением полного уравнения Шредингера с гамильтонианом $H = H_0 + H_{вз}$:

$$\Phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \Phi(0), \quad (32.21)$$

находим, что

$$| E = \hbar\varepsilon_{\mathbf{k}_0} + \hbar\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0}. \quad (32.22)$$

Это соотношение и дает нам искомую интерпретацию: $\hbar\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0}$ представляет собой сдвиг энергии электрона в состоянии \mathbf{k}_0 . В рамках второго порядка теории возмущений он определяется выражением (32.15). Этот сдвиг энергии возникает благодаря испусканию и последующему поглощению фонона. Поскольку при испускании и последующем поглощении закон сохранения энергии не выполняется, то говорят о «виртуальном» испускании или поглощении. Тем самым мы получаем чрезвычайно важный и для физики элементарных частиц результат, что энергия электрона благодаря виртуальному испусканию и поглощению квантов, в данном случае фононов, оказывается смещенной. Если рассматривается покоящийся электрон, т. е. $\mathbf{k}_0 = 0$, то говорят о собственной энергии частицы.

Для не слишком больших значений \mathbf{k}_0 величины $E \equiv E_{\mathbf{k}_0}$, $E_{\mathbf{k}_0}^0 \equiv \hbar\varepsilon_{\mathbf{k}_0}$, $\Delta E_{\mathbf{k}_0} \equiv \hbar\Delta\varepsilon_{\mathbf{k}_0}$ можно разложить в ряд по \mathbf{k}_0 :

$$E_{\mathbf{k}_0}^0 = E_0^0 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^*}, \quad (32.23)$$

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^{**}}, \quad (32.24)$$

$$\Delta E_{\mathbf{k}_0} = \Delta E_0 - C \cdot k_0^2. \quad (32.25)$$

Здесь m^* — эффективная масса электрона в *отсутствии фононных колебаний* решетки. Коэффициент разложения при k_0^2 в (32.24) выбран по аналогии с (32.23), так что m^{**} в этом разложении имеет очевидный смысл эффективной массы электрона в деформируемой решетке. C в (32.25) является коэффициентом в разложении (32.15) и явно будет вычислен ниже (§ 35). Здесь мы положим формально

$$C = \frac{\hbar^2 \delta}{2m^*}. \quad (32.26)$$

Если выражения (32.23—32.26) внести в (32.22) и сравнить члены, пропорциональные k_0^2 , то получится следующий результат:

$$\frac{1}{m^{**}} = \frac{1}{m^*} - \frac{\delta}{m^*}, \quad (32.27)$$

или, если $\delta \ll 1$,

$$| m^{**} = m^*(1 + \delta). \quad (32.28)$$

В рамках физики твердого тела результаты, относящиеся как к собственной энергии, так и к изменению массы, могут быть легко поняты. Проходящий через решетку электрон взаимодействует с ионами, смещает их из положений равновесия и тем самым создает для себя более глубокий потенциал. Следовательно, его энергия понижается, а его эффективная масса возрастает.

Этот электрон, сопровождаемый деформациями решетки («облаком поляризации»), называется поляроном (более подробно см. § 35). В противоположность релятивистской квантовой теории, где изменение массы бесконечно большое, в данном случае оно конечно. В соответствии с состоянием движения электрона в одном и том же кристалле могут наблюдаться различные массы: если электрон движется медленно, то возникает рассмотренное здесь изменение массы или, как говорят, «перенормировка мас-

Рис. 48. Спонтанное испускание двух фононов.

с»; если же электрон движется очень быстро, то ионы не успевают следовать за ним и появляется масса «голого» электрона.

С помощью введенных выше правил мы можем рассмотреть и другие процессы, которые ведут к действительному изменению начального состояния. Речь идет о процессе с участием двух фононов. В качестве примера на рис. 48 приведена диаграмма, представляющая спонтанное испускание двух фононов с волновыми векторами w и w' . Вычисление коэффициентов волновой функции и соответствующих вероятностей перехода мы представляем в качестве упражнения самому читателю.

Задания к § 32

1. Определить коэффициенты c_{w_1, w_2} в разложении

$$\tilde{\Phi}(t) = \sum_{w_1, w_2} c_{w_1, w_2}(t) b_{w_1}^+ b_{w_2}^+ a_{k_0 - w_1 - w_2}^+ \Phi_0, \quad (A32.1)$$

если в качестве начального состояния выбрана функция

$$\Phi(0) = a_{k_0}^+ \Phi_0 \quad (A32.2)$$

и в основу рассмотрения положена представленная на рис. 48 диаграмма. Показать, что и в этом случае снова появляется

δ -функция, выражающая закон сохранения энергии для двух-фононного испускания.

2. *Электронный полярон.* Сопоставить электрон в зоне проводимости с экситоном Френкеля и найти его собственную энергию. Указание. Применить метод эффективной массы и сделать в (25,3) следующие замены:

$$I_i \rightarrow x', \quad e_i \rightarrow e \psi_L^\dagger(x') \psi_L(x'), \quad \sum_i \rightarrow \int \dots d^3x'.$$

Затем разложить полевой оператор $\psi_L(x')$ электрона в зоне проводимости по плоским волнам и воспользоваться заданием 3 из § 25.

§ 33. Теория возмущений высших порядков

В теории возмущений высших порядков мы поступаем в принципе так же, как и в первом и втором порядках теории возмущений. Нам следовало бы искать функцию состояния, которая удовлетворяет *точному уравнению*

$$\left| \begin{aligned} \tilde{\Phi}(t) = \tilde{\Phi}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau) d\tau \tilde{\Phi}(\tau). \end{aligned} \right. \quad (33.1)$$

Мы попытаемся найти искомую функцию состояния $\tilde{\Phi}(t)$, решая

$$\tilde{\Phi}^{(n)}(t) = \tilde{\Phi}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_n) d\tau_n \tilde{\Phi}^{(n-1)}(\tau_n) \quad (33.2)$$

методом итераций, т. е. при n -м шаге в левой части этого уравнения получаем функцию $\tilde{\Phi}^{(n)}$, если в правую часть (33.1) подставлена найденная в предыдущей $(n-1)$ -й итерации функция состояния $\tilde{\Phi}^{(n-1)}$. При этом условимся, что для нулевой итерации справедливо соотношение

$$\tilde{\Phi}^{(0)}(\tau) = \Phi(0). \quad (33.3)$$

Как мы уже видели в § 32, во второй итерации получается следующая волновая функция:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}^{(2)}(t) = \Phi(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_1) d\tau_1 \Phi(0) + \\ + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_2) d\tau_2 \int_0^{\tau_2} \tilde{H}_{вз}(\tau_1) d\tau_1 \Phi(0), \end{aligned} \quad (33.4)$$

которую можно представить в виде суммы $\Phi^{(1)}$ и поправочного члена, содержащего произведение двух операторов взаимодей-

вия и, следовательно, имеющего второй порядок по величине взаимодействия. Если теперь подставить это выражение (33.4) в правую часть (33.2), то получим волновую функцию $\tilde{\Phi}^{(3)}$. Подстановка двух первых членов (33.4) в (33.2) вновь прямо приводит к выражению (33.4). А при подстановке последнего члена в (33.4) в выражение (33.2) появляется еще один новый член, так что в целом волновая функция третьего порядка принимает вид

$$\tilde{\Phi}^{(3)}(t) = \tilde{\Phi}^{(2)} + \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_3) d\tau_3 \int_0^{\tau_3} \tilde{H}_{вз}(\tau_2) d\tau_2 \int_0^{\tau_2} \tilde{H}_{вз}(\tau_1) d\tau_1 \Phi(0). \quad (33.5)$$

При каждой новой итерации, как легко видеть, к волновой функции добавляется новый член, представляющий собой просто n -кратный интеграл по операторам взаимодействия. Отсюда следует, что функцию, полученную в n -м порядке приближения, можно представить в виде следующего выражения:

$$\tilde{\Phi}^{(n)}(t) = \Phi(0) + \sum_{v=1}^n \frac{1}{(i\hbar)^v} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_v) d\tau_v \times \int_0^{\tau_v} \tilde{H}_{вз}(\tau_{v-1}) d\tau_{v-1} \dots \int_0^{\tau_2} \tilde{H}_{вз}(\tau_1) d\tau_1 \Phi(0). \quad (33.6)$$

Тем самым проблема отыскания $\tilde{\Phi}^{(n)}(t)$ в принципе решена, если известно, как действует оператор $\tilde{H}_{вз}$. При практическом решении, очевидно, необходимо последовательно действовать отдельными операторами на $\Phi(0)$ и определять коэффициенты. Выделим из волновой функции (33.6) ту часть, которая вновь приводит к присутствующему в этой функции начальному состоянию $\Phi(0) = a_{k_0}^+ \Phi_0$. Эта часть представляется диаграммой вида рис. 49, которая соответствует восьмому члену ($v=8$) в формуле (33.6). Наши рассуждения §§ 30 и 32 позволяют довольно просто вычислить стоящие при этом члене коэффициенты. В каждой вершине, при этом, следует проследить за выполнением закона сохранения импульса.

Кроме того, нужно помнить, что каждому испусканию и последующему поглощению соответствует множитель $(-ig_w)(-ig_w^*)$, а по волновым векторам w виртуально испущенных фононов следует провести суммирование.

Наконец нам следует вычислить кратные интегралы, указанные здесь для случая, представленного на рис. 49:

$$\sum_{w_1 \dots w_4} (-1)^4 |g_{w_4}|^2 \dots |g_{w_1}|^2 \int_0^t d\tau_8 \int_0^{\tau_8} d\tau_7 \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 e^{\dots} \quad (33.7)$$

Теперь нужно еще определить стоящие под интегралом времен-

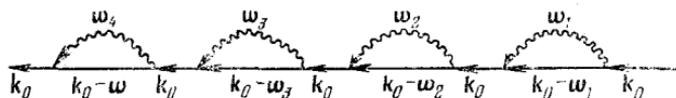


Рис. 49. Диаграмма восьмого порядка (см. текст).

ные множители. Это делается с помощью следующих уже известных правил:

приходящий электрон $e^{-i\varepsilon_{k_0}\tau}$,

уходящий электрон $e^{i\varepsilon_{k_0-w_1}\tau}$,

уходящий фотон $e^{i\omega_{w_1}\tau}$.

Таким образом, в вершине 1 появляется общий множитель $e^{i\Delta_1\tau}$, (33.8)

где введено сокращенное обозначение

$$\Delta_1 = \varepsilon_{k_0-w_1} + \omega_{w_1} - \varepsilon_{k_0}. \quad (33.9)$$

В вершине 1 время τ следует идентифицировать с τ_1 и проинтегрировать от 0 до τ_2 :

$$\int_0^{\tau_2} e^{i\Delta_1\tau_1} d\tau_1 = \frac{e^{i\Delta_1\tau_2} - 1}{i\Delta_1}. \quad (33.10)$$

Вершина 2 описывает обратный процесс, которому соответствует множитель

$$e^{-i\Delta_1\tau_2}. \quad (33.11)$$

Теперь нам следует перемножить (33.10) и (33.11) и проинтегрировать по τ_2 . Это дает следующий результат:

$$\int_0^{\tau_3} e^{-i\Delta_1\tau_2} d\tau_2 \frac{e^{i\Delta_1\tau_2} - 1}{i\Delta_1} = \frac{\tau_3}{i\Delta_1}. \quad (33.12)$$

Осциллирующими членами здесь, как и ранее, пренебрегаем, поскольку для достаточно больших промежутков времени они несущественны.

В следующей вершине получившийся результат следует умножить на множитель вида (33.8) при $\tau = \tau_3$ и проинтегрировать:

$$\int_0^{\tau_4} e^{i\Delta_1\tau_3} d\tau_3 \frac{\tau_3}{i\Delta_1} = \frac{\tau_4 (e^{i\Delta_1\tau_4} - 1)}{i\Delta_1 \cdot i\Delta_2}. \quad (33.13)$$

Если умножить результат (33.13) вновь на соответствующий вершине 4 множитель и снова проинтегрировать, то мы получим

$$\int_0^{\tau_4} e^{-i\Delta_2\tau_4} d\tau_4 \frac{\tau_4 (e^{i\Delta_2\tau_4} - 1)}{i\Delta_1 \cdot i\Delta_2} = \frac{1}{2} \tau_5^2 \cdot \frac{1}{i\Delta_1} \cdot \frac{1}{i\Delta_2}. \quad (33.14)$$

Продолжение этой процедуры совершенно очевидно и после последнего интегрирования приводит к результату

$$\int_0^t e^{-i\Delta_4\tau_8} d\tau_8 \frac{1}{3!} \cdot \frac{1}{i\Delta_1} \cdot \frac{1}{i\Delta_2} \cdot \frac{1}{i\Delta_3} = \frac{1}{4!} t^4 \frac{1}{i\Delta_1} \cdot \frac{1}{i\Delta_2} \cdot \frac{1}{i\Delta_3} \cdot \frac{1}{i\Delta_4}. \quad (33.15)$$

Коэффициент волновой функции, соответствующий диаграмме рис. 49 с четырьмя виртуальными процессами испускания, согласно (33.7) и (33.15) имеет вид

$$\frac{1}{4!} t^4 (-i)^4 \left(\sum_w \frac{|g_w|^2}{\underbrace{\varepsilon_{k_0} - \varepsilon_{k_0-w} - \omega_w}_{\Delta\varepsilon_{k_0}}} \right)^4. \quad (33.16)$$

Полная волновая функция $\tilde{\Phi}(t)$ складывается из суммы членов

$$a_{k_0}^+ \Phi_0 \left(1 + (-it\Delta\varepsilon_{k_0}) + \frac{1}{2!} (-it\Delta\varepsilon_{k_0})^2 + \dots + \frac{1}{n!} (-it\Delta\varepsilon_{k_0})^n + \dots \right)$$

Рис. 50.

различного порядка. Различные вклады можно представить суммой диаграмм типа той, что представлена на рис. 49. Таким образом, существует взаимно однозначное соответствие между диаграммами и волновыми функциями (рис. 50).

Каждой из этих диаграмм соответствует одна и та же волновая функция, однако со своим временным множителем, как это показано на рис. 50. Очевидно, что суммирование в предельном случае $n \rightarrow \infty$ дает

$$| \Phi_{k_0}(t) = a_{k_0}^+ \Phi_0 e^{-it\Delta\varepsilon_{k_0}}, \quad (33.17)$$

Тем самым мы действительно пришли к утверждению, что рассмотренные здесь процессы приводят только к смещению энергии, как это было указано в § 32.

Очень важно установить, что наряду с рассмотренными здесь диаграммами возможны диаграммы совершенно другого типа.

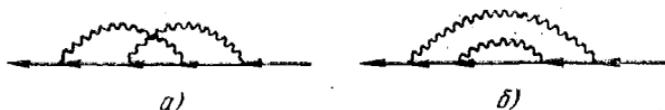


Рис. 51. Вклады четвертого порядка в собственную энергию.

Для этого следует лишь подумать о том, какие еще процессы могут возникнуть при последовательном включении операторов взаимодействия. И снова лучше всего это делать с помощью графического представления. При этом появляются диаграммы типа представленных на рис. 51, которые, как можно показать, дают коэффициенты, пропорциональные t , и, следовательно, так же приводят к смещению энергии. Полное смещение энергии можно получить, если просуммировать все подобные вклады, возникающие от так называемых «связанных диаграмм».

§ 34. Теорема о точной форме решения

В §§ 30, 32 и 33 мы рассмотрели решение уравнения Шредингера для случая взаимодействия между электронами и колебаниями решетки с помощью нестационарной теории возмущений. В §§ 34—36 мы будем искать решения *независящего от времени уравнения Шредингера* $H\Phi = E\Phi$.

Сначала в этом параграфе мы введем одну весьма общую и полезную теорему о структуре решений этого уравнения. Для этого следует более обстоятельно заняться видом оператора Гамильтона. Примеры гамильтонианов встречались нам в § 29, например в (29.24), причем периодичный с периодом решетки потенциал был опущен. Поскольку наша теорема так же легко доказывается и в присутствии такого потенциала в H , то мы будем исходить из общего оператора Гамильтона:

$$H = \int \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi(\mathbf{x}) d^3x + \sum_{\mathbf{w}} \hbar \omega_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^{\dagger} b_{\mathbf{w}} + \int \psi^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(\sum_{\mathbf{w}} (W_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}} b_{\mathbf{w}} + W_{\mathbf{w}}^*(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}} b_{\mathbf{w}}^{\dagger}) \right) \psi(\mathbf{x}) d^3x. \quad (34.1)$$

Здесь предполагается, что потенциал периодичен с периодом решетки:

$$V(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = V(\mathbf{x}). \quad (34.2)$$

Равным образом примем, что функции, которые описывают взаимодействие между электронами и фононами,

$$W_w(\mathbf{x}+1) = W_w(\mathbf{x}), \quad (34.3)$$

также периодичны с периодом решетки. Если теперь положить $V \equiv 0$, заменить m на эффективную массу m^* и предположить, что W_w постоянна в пространстве, то мы вернемся, естественно, от (34.1) к (29.24). Если же мы имеем дело лишь с малым числом частиц, то формализм вторичного квантования целесообразно оставить и перейти к обычному представлению с помощью уравнения Шредингера. Этот переход, как мы видели в § 13, осуществляется, если представить функцию состояния в виде

$$\Phi = \int \dots \int f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \{b_w^+\}) \psi^+(\mathbf{x}_1) \dots \times \\ \times \dots \psi^+(\mathbf{x}_N) \Phi_{0,эл} d^3x_1 \dots d^3x_N. \quad (34.4)$$

Здесь $\Phi_{0,эл}$ — вакуумное состояние системы электронов. Аргумент $\{b_w^+\}$ в f следует понимать в том смысле, что f может зависеть от всех b_w^+ . В следующем параграфе мы познакомимся с соответствующим примером.

Обобщение по сравнению с § 13 состоит, таким образом, в том, что волновая функция f , которая стоит в (34.4) как коэффициент разложения, теперь может содержать еще операторы рождения b_w^+ и, возможно, операторы уничтожения b_w .

Как было показано на примере, приведенном в § 13, функция f удовлетворяет уравнению Шредингера в «конфигурационном пространстве». Примененную там процедуру можно сразу перенести на наш случай, после чего находим уравнение

$$\left\{ \sum_{j=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j + V(\mathbf{x}_j) \right\} + \sum_w \hbar \omega_w b_w^+ b_w + \right. \\ \left. + \sum_{j=1}^N \sum_w \left\{ W_w(\mathbf{x}_j) e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}_j} b_w + W_w^*(\mathbf{x}_j) e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}_j} b_w^+ \right\} \right\} \times \\ \times f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \{b_w^+\}) = E f(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \{b_w^+\}). \quad (34.5)$$

Это уравнение имеет в известной степени смешанный характер. Относительно пространственных переменных электронов $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ это обычное уравнение Шредингера, а относительно колебаний решетки мы пользуемся, напротив, операторами b_w^+ и b_w . Теперь введем теорему о виде волновой функции f , которая представляет собой существенное обобщение теоремы Блоха § 17. При доказательстве теоремы Блоха мы исходили из того, что оператор Гамильтона является периодичным с периодом ре-

шетки или, другими словами, что он инвариантен относительно операции трансляции

$$T_1: x_j \rightarrow x_j + 1. \quad (34.6)$$

Поскольку теперь учитываются и колебания решетки, то H более не является трансляционно инвариантным. Между тем, следует позаботиться, чтобы при сдвиге координат электрона координаты решетки преобразовывались таким образом, чтобы электроны «видели» те же деформации решетки. Для этого рассмотрим в качестве примера разложение одномерных смещений решетки (40.13), которые имеют вид

$$q(x) = \sum_w \text{const} (e^{iwx} b_w + e^{-iwx} b_w^+). \quad (34.7)$$

Если сдвинуться в решетке на вектор 1 , то $q(x)$ переходит в $q(x+1)$. В правой части это означает замену

$$e^{iwx} b_w \rightarrow e^{i w(x+1)} b_w \quad (34.8)$$

и

$$e^{-iwx} b_w^+ \rightarrow e^{-i w(x+1)} b_w^+. \quad (34.9)$$

Если b_w, b_w^+ рассматривать как «переменные», то исходное отклонение $q(x)$ можно получить вновь, если одновременно с преобразованием $x \rightarrow x+1$ предпринять следующее преобразование:

$$b_w \rightarrow b_w e^{-iw1}, \quad b_w^+ \rightarrow b_w^+ e^{iw1}. \quad (34.10)$$

Объединяя (34.6) и (34.10), следующим образом определим оператор трансляции T_1 :

$$T_1: \begin{cases} x_j \rightarrow x_j + 1, \\ b_w \rightarrow b_w e^{-iw1}, \\ b_w^+ \rightarrow b_w^+ e^{iw1}. \end{cases} \quad (34.11)$$

Подстановкой (34.11) можно сразу же убедиться, что H инвариантен относительно T_1 или, другими словами, что оператор T_1 коммутирует с гамильтонианом H :

$$| T_1 H - H T_1 = 0. \quad (34.12)$$

Согласно известному правилу квантовой теории, f можно всегда выбрать так, что эта функция будет собственной функцией не только (34.5), но и T_1 , т. е.

$$T_1 f = \lambda f. \quad (34.13)$$

По аналогии с доказательством теоремы Блоха § 17 следует считать, что абсолютная величина λ равна 1:

$$\lambda = e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (34.14)$$

В общем случае f можно представить в виде

$$| f = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} U(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \{b_{\mathbf{w}}^+\}) \Phi_0, \quad (34.15)$$

где U — операторная функция, действующая на основное состояние решетки Φ_0 , \mathbf{X} — координата центра тяжести электронов. Если подставить (34.15) в (34.13), учитывая при этом (34.14), то сразу получим важное соотношение

$$| U(\mathbf{x}_1 + 1, \dots, \mathbf{x}_N + 1; \{b_{\mathbf{w}}^+ e^{i\mathbf{w}\mathbf{l}}\}) = U(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N; \{b_{\mathbf{w}}^+\}). \quad (34.16)$$

Соотношения (34.15) и (34.16) утверждают, что электроны и в колеблющейся решетке ведут себя как плоские модулированные волны, причем коэффициент модуляции периодичен с периодом решетки в предположении, что искажения решетки преобразуются соответствующим образом. Особый случай (34.15), (34.16) имеет место для непрерывной среды, т. е., например, для оператора Гамильтона (29.24): вместо сдвига на вектор решетки (или кратный ему вектор) в этом случае возможен сдвиг на любой вектор, который, в частности, может быть и бесконечно малым $\delta\mathbf{l}$. С важным приложением (34.15) и (34.16) мы познакомимся в § 35.

§ 35. Полярон Фрëлиха. Собственная энергия и перенормированная масса

Рассмотрим движение отдельного электрона, который движется в полярном кристалле, положив в основу рассмотрения, как и в § 29, модель континуума, т. е. непрерывной среды. В рамках этого приближения уравнение Шредингера (34.5) принимает вид

$$| \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \hbar\omega \sum_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} + \hbar \sum_{\mathbf{w}} (g_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w}} + g_{\mathbf{w}}^* e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}} b_{\mathbf{w}}^+) \right\} f = E f. \quad (35.1)$$

Ради простоты предположим, что частота ω не зависит от \mathbf{w} , что приближенно выполняется для так называемых оптических колебаний. Коэффициенты g даются выражением (29.27), однако их явный вид понадобится нам только в конце этого параграфа. Согласно теореме (34.15—34.16) представим искомую волновую функцию в виде

$$f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, \{b_{\mathbf{w}}^+\}) \Phi_0. \quad (35.2)$$

Для дальнейшего очень важно найти приемлемое выражение для $u(\mathbf{x}, \{b_{\mathbf{w}}^+\})$. Действие этой операторной функции u на основное состояние должно описывать деформацию решетки, которая воз-

никает вокруг электрона, находящегося в точке x . В заданиях к § 8 мы познакомились со случаем деформации решетки бесконечно тяжелым зарядом. Нам удалось показать, что волновые функции деформированного состояния могут быть представлены через волновые функции смещенного гармонического осциллятора. Аналогично и в случае электрона конечной массы кажется разумным описать деформацию решетки с помощью функции

$$u(x, \{b_w^+\}) = \prod_w \left(e^{b_w^+ \beta_w(x)} \mathcal{N}_w \right), \quad (35.3)$$

где экспоненциальные функции снова представляют смещенные гармонические осцилляторы.

Величина смещения $\beta_w(x)$ будет, естественно, зависеть от x . Кроме того, вовсе не следует ожидать, что отклонение будет непременно таким, как в случае бесконечно тяжелой частицы. Главная задача состоит теперь в том, чтобы определить коэффициенты $\beta_w(x)$. Заметим еще, что нормировочные множители в (35.3) задаются выражением (см. (6.25))

$$\mathcal{N}_w = e^{-\frac{1}{2} |\beta_w(x)|^2}. \quad (35.4)$$

С помощью теоремы (34.16) можно сильно ограничить вид пока еще совершенно произвольных функций $\beta_w(x)$. Согласно (34.16) должно выполняться соотношение

$$u(x + \delta l, \{b_w^+ e^{i w \delta l}\}) = u(x, \{b_w^+\}), \quad (35.5)$$

которое должно быть справедливым и в случае бесконечно малых смещений δl . Если подставить сюда явный вид (35.3), то сразу получим уравнение

$$b_w^+ e^{i w \delta l} \beta_w(x + \delta l) = b_w^+ \beta_w(x). \quad (35.6)$$

Это уравнение разрешается с помощью подстановки

$$\beta_w(x) = e^{-i w x} \beta_w, \quad (35.7)$$

где β_w в правой части является независящей от x постоянной. Тем самым мы нашли весьма специфическую форму волновой функции (подход Ли, Лоу, Пайнса)

$$f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i k x} \mathcal{N} \exp \left\{ \sum_w \beta_w b_w^+ e^{-i w x} \right\} \Phi_0 \quad (35.8)$$

с нормировочным множителем

$$\mathcal{N} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_w |\beta_w|^2 \right\}. \quad (35.9)$$

В этом решении остались еще не определенными постоянные коэффициенты β_w . Для их определения подставим решение (35.8)

в уравнение Шредингера (35.1). При действии оператора $-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta$ следует просто продифференцировать экспоненциальную функцию по x . Поскольку все операторы b_w^+ между собой коммутируют, то нет необходимости следить за точным порядком следования дифференцируемых функций. Действие операторов b_w^+ и b_w оператора Гамильтона (35.1) на функцию (35.8) уже было обстоятельно обсуждено в разделе о смещенном гармоническом осцилляторе и не представляет никаких затруднений. Основываясь на этих соображениях, практически без труда и длинных вычислений получаем

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2}{m^*} k \sum_w \beta_w b_w^+ e^{-iwx} w - \\ & - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\sum_w \beta_w b_w^+ e^{-iwx} (-iw) \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_w \beta_w b_w^+ e^{-iwx} w^2 + \\ & + \hbar \omega \sum_w b_w^+ \beta_w e^{-iwx} + \hbar \sum_w g_w e^{iwx} \beta_w e^{-iwx} + \hbar \sum_w g_w^* e^{-iwx} b_w^+ = E_k. \end{aligned} \quad (35.10)$$

Уравнение (35.10), совершенно аналогично случаю смещенного гармонического осциллятора, мы «сократили» на функцию (35.8), так что в (35.10) осталось только операторное выражение. Можно подробно показать, что для не слишком сильной связи третьим членом в левой части (35.10) можно пренебречь. Получившееся после этого уравнение имеет следующую структуру: в уравнении имеются величины, не зависящие от операторов b_w^+ , и наряду с ними величины, пропорциональные b_w^+ . Для того чтобы это операторное уравнение удовлетворялось, коэффициенты при обоих типах выражений должны обратиться в нуль. Рассмотрим вначале множитель, стоящий перед b_w^+ . Тогда непосредственно получаем уравнения

$$\beta_w \left\{ -\frac{\hbar^2}{m^*} kw + \frac{\hbar^2}{2m^*} w^2 + \hbar \omega \right\} + \hbar g_w^* = 0, \quad (35.11)$$

решая которые, получаем следующие выражения для коэффициентов β_w :

$$\beta_w = -\frac{\hbar g_w^*}{\left\{ \hbar^2 w^2 / 2m^* - \hbar^2 kw / m^* + \hbar \omega \right\}}. \quad (35.12)$$

Теперь рассмотрим в (35.10) коэффициенты при независящих от b_w^+ членах. Эти коэффициенты должны удовлетворять уравнению

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + \hbar \sum_w g_w \beta_w - E_k = 0.$$

Это уравнение частично содержит еще и β_w . Если выразить β_w в этом уравнении через (35.12), то все неизвестные устраняются и мы получаем непосредственно собственные значения энергии

$$\left| E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \sum_w \frac{|\hbar g_w|^2}{\{\hbar^2 w^2/2m^* - \hbar^2 kw/m^* + \hbar\omega\}} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \Delta E_k. \quad (35.13) \right.$$

Сумма в (35.13) уже встречалась нам (с точностью до множителя \hbar ввиду связи $\Delta E = \hbar \Delta \varepsilon$) в (32.15). Она представляет собой не что иное, как выражение для собственной энергии (при $k=0$) и перенормировки массы (см. § 32).

Для сравнения с экспериментом необходимо иметь явные выражения для собственной энергии и перенормированной массы. Согласно (29.27) имеет место равенство

$$|\hbar g_w| = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{e}{|w|} \left[2\pi \hbar \omega \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \right]^{1/2}. \quad (35.14)$$

Здесь V — объем кристалла, e — заряд электрона, ε_∞ — диэлектрическая проницаемость в оптической области частот, ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость. Если подставить это выражение в (35.13) и преобразовать сумму в интеграл, то (35.13) легко вычисляется, причем результат удобнее всего выразить через безразмерную постоянную α :

$$\left| \alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \frac{e^2 u}{\hbar \omega}, \quad (35.15) \right.$$

где u имеет вид

$$\left| u = \left(\frac{2m^* \omega}{\hbar} \right)^{1/2}. \quad (35.16) \right.$$

В результате получаем следующее выражение для энергии полярона:

$$E_k = -\hbar \omega \alpha + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \left(1 - \frac{\alpha}{6} \right) + O(k^4), \quad (35.17)$$

откуда заключаем, что собственная энергия и перенормированная масса равны соответственно

$$E_0 = -\alpha \hbar \omega \quad \text{и} \quad m^{**} \approx m^* (1 + \alpha/6). \quad (35.18)$$

Постоянная α играет, вообще говоря, роль константы связи, в зависимости от величины которой следует применять то или иное приближение. Для $\alpha < 6$ можно применять методы, использованные в §§ 32 и 35, для $\alpha \gg 10$ — другой метод, предложенный Пекаром. Важный в практическом отношении промежуточ-

ный случай $\alpha \approx 10$ стало возможным вычислять с помощью «интеграла по траекториям» Фейнмана, что, к сожалению, не может быть изложено здесь.

§ 36. Эффективное взаимодействие между поляронами

В предыдущем параграфе мы исследовали движение одного электрона, взаимодействующего с колебаниями решетки. При этом, если обратиться к наглядной интерпретации, физика этого взаимодействия состоит в том, что электрон поляризует вокруг себя решетку, т. е. смещает ионы.

В этом параграфе теперь следует показать, что поляризация решетки ведет не только к изменению собственной энергии и к перенормировке массы отдельных электронов, но и создает взаимодействие между самими электронами. Для простоты здесь будет рассмотрен случай двух электронов или поляронов. Однако развитые соображения могут быть легко распространены на случай большего числа частиц. Исходным пунктом, как всегда, является гамильтониан, который в случае двух частиц, взаимодействующих с колебаниями решетки, имеет следующий вид:

$$H = H_{эл1} + H_{эл2} + H_p + H_{вз1} + H_{вз2} + H_{1-2}. \quad (36.1)$$

Первые два оператора Гамильтона относятся к свободным частицам:

$$H_{элj} = -\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \Delta_j, \quad j = 1, 2, \quad (36.2)$$

причем следует допустить, что они могут иметь различные массы. Оператор Гамильтона H_p описывает колебания решетки:

$$H_p = \sum_w \hbar \omega_w^+ b_w. \quad (36.3)$$

Следующие два оператора Гамильтона:

$$H_{взj} = \hbar \sum_w (g_w e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_j} b_w + g_w^* e^{-i\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}_j} b_w^+), \quad j = 1, 2, \quad (36.4)$$

представляют взаимодействие j -й частицы с колебаниями решетки.

Выражения (36.2—36.4) уже встречались нам в предыдущих параграфах и не нуждаются более в дальнейшем обсуждении. Ради простоты в (36.4) предполагается, что константы связи для различных частиц 1 и 2 имеют одинаковую величину. Отметим все же, что для зарядов противоположных знаков знак g_w, g_w^* в $H_{вз1}$ также должен быть выбран противоположным знаком g_w, g_w^* в $H_{вз2}$. Гамильтониан H_{1-2} описывает прямое кулоновское

взаимодействие между поляронами. Следует также учесть, что из-за поляризации атомных оболочек в это взаимодействие следует ввести диэлектрическую проницаемость ϵ_∞ :

$$H_{1-2} = \frac{e^2}{\epsilon_\infty |x_1 - x_2|}. \quad (36.5)$$

Попытаемся решить соответствующее гамильтониану (36.1) уравнение Шредингера и воспользуемся при этом следующим наглядным представлением. Как мы видели в предыдущем параграфе, смещение ионов решетки математически описывается действием функции $u(x, \{b_w^+\})$ на состояние неискаженной решетки («вакуумное состояние»). Эта функция известна нам еще из раздела о смещенном гармоническом осцилляторе. Если в решетке имеются две частицы, то обе они будут поляризовать решетку. Тогда, во всяком случае приближенно, можно ожидать, что создаваемые частицами поляризации (возмущения решетки) просто складываются. Поэтому имеет смысл попытаться ввести волновую функцию, которая отражает это обстоятельство. Если исходить из поляронов с волновыми векторами k_1 и k_2 и для каждого из них воспользоваться волновой функцией вида (35.8), то мы получим следующее выражение для волновой функции:

$$f_{k_1, k_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{V} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} \mathcal{N} \times \\ \times \exp \left\{ \sum_w b_w^+ \left(\beta_w^{(1)} e^{-iwx_1} + \beta_w^{(2)} e^{-iwx_2} \right) \right\} \Phi_0. \quad (36.6)$$

Цифры 1 и 2 указывают на парциальные вклады поляронов в искажение решетки (см. также задание на стр. 267); явные выражения $\beta_w^{(1)}$ и $\beta_w^{(2)}$ даны в (35.12), причем следует заменить m^* на m_j^* и k на k_j . В то время как множитель $1/V$ (V — объем кристалла) обеспечивает нормировку плоских волн, решеточная функция должна быть нормирована еще множителем \mathcal{N} .

Согласно (6.25) (смещенный осциллятор), \mathcal{N} дается выражением

$$\mathcal{N} = \prod_w e^{-\frac{1}{2} |\gamma_w|^2}, \quad (36.7)$$

где γ_w теперь имеет вид

$$\gamma_w = \beta_w^{(1)} e^{-iwx_1} + \beta_w^{(2)} e^{-iwx_2}. \quad (36.8)$$

Подставляя (36.8) в (36.7), получаем явное выражение для \mathcal{N} :

$$\mathcal{N} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_w |\beta_w^{(1)}|^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_w |\beta_w^{(2)}|^2 \right\} \cdot \mathcal{N}_c, \quad (36.9)$$

где

$$\mathcal{N}_c = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{w}} \beta_{\mathbf{w}}^{(1)} \beta_{\mathbf{w}}^{(2)*} e^{i\mathbf{w} \cdot (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)} + (1 \leftrightarrow 2) \right\}. \quad (36.10)$$

В первых двух множителях (36.9) мы узнаем нормировочные множители отдельных поляронов (35.9). Новым является зависящий от расстояния нормировочный множитель \mathcal{N}_c . С помощью подробного расчета, однако, можно показать, что этот множитель, по крайней мере при больших расстояниях между частицами 1 и 2, можно считать постоянной величиной. Подействуем оператором Гамильтона (36.1) на (36.6). Дифференцирование при действии операторов Δ_1 и Δ_2 выполняется сразу, как и в (35.10). При действии $b_{\mathbf{w}}$ на (36.6) нужно учесть, что $\beta_{\mathbf{w}}$ из § 35 теперь следует заменить на $\gamma_{\mathbf{w}}$ (36.8).

Простое, полностью аналогичное предыдущему параграфу вычисление дает

$$\begin{aligned} H f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = & \\ = & \frac{\left\{ \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_1^*} - \frac{\hbar^2}{m_1^*} \mathbf{k}_1 \sum_{\mathbf{w}} \beta_{\mathbf{w}}^{(1)} b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_1} \right\}}{m_1^*} + \\ & + \frac{\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \sum_{\mathbf{w}} \beta_{\mathbf{w}}^{(1)} b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_1} w^2 + (1 \rightarrow 2)}{m_1^*} + \\ & + \hbar \omega \sum_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ (\beta_{\mathbf{w}}^{(1)} e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_1} + \beta_{\mathbf{w}}^{(2)} e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_2}) + \\ & + \hbar \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}} (e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_1} + e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_2}) (\beta_{\mathbf{w}}^{(1)} e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_1} + \beta_{\mathbf{w}}^{(2)} e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_2}) + \\ & + \hbar \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}}^* (e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_1} + e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_2}) b_{\mathbf{w}}^+ + H_{1-2} \} f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (36.11) \end{aligned}$$

При этом выражение, аналогичное третьему члену в (35.10), которым мы тогда пренебрегли, также опущено. Скобка в (36.11), обозначенная через $(1 \rightarrow 2)$, может быть получена из предыдущих слагаемых, для чего следует лишь всюду заменить индекс 1 на 2. Точно так же рассмотрим оставшуюся часть (36.11) и отыщем в ней прежде всего все члены, содержащие только индекс 1. Эти члены в (36.11) подчеркнуты или выделены знаком $\uparrow \uparrow$. Видно, что все эти члены совпадают с членами (35.10). Поскольку мы здесь выбрали коэффициенты¹⁾ $\beta_{\mathbf{w}}$, $\beta_{\mathbf{w}}^*$ в том же виде, как в (35.10), то сумму всех членов с индексом (1) можно, со-

¹⁾ Мы считаем, что в нулевом приближении $\beta_{\mathbf{w}}$, $\beta_{\mathbf{w}}^*$ определены из однополяронной проблемы. Тогда $\beta_{\mathbf{w}}$ можно заимствовать из (35.12).

гласно (35.10), заменить на $E_{\mathbf{k}_1}^{(1)}$, где индекс (1) вверху указывает на частицу 1. Совершенно симметричным образом члены с индексом (2) приводят к $E_{\mathbf{k}_2}^{(2)}$.

Самым главным для нас является член, стоящий в пятой строке (36.11), который зависит как от индекса (1), так и от индекса (2):

$$W = \hbar \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}} (\beta_{\mathbf{w}}^{(1)} e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)} + \beta_{\mathbf{w}}^{(2)} e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)}). \quad (36.12)$$

Заменим здесь $\beta_{\mathbf{w}}^{(j)}$ на его явное выражение (35.12) (при $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_j$ и $m^* \rightarrow m_j^*$). Поскольку в последующем изложении мы будем рассматривать только медленно движущиеся поляроны, положим в (35.12), наконец, $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 \equiv \mathbf{k} = 0$. Тогда получаем

$$W(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = - \sum_{\mathbf{w}} |\hbar g_{\mathbf{w}}|^2 \left\{ e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \frac{1}{\hbar\omega + \hbar^2 w^2 / 2m_2^*} + (1 \leftrightarrow 2) \right\}. \quad (36.13)$$

Собирая вместе все стоящие в (36.11) члены, получаем

$$Hf_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = (E_{\mathbf{k}_1}^{(1)} + E_{\mathbf{k}_2}^{(2)}) f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} + \frac{W(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) + H_{1-2}}{W_{\text{полн}}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (36.14)$$

Этот результат имеет для нас фундаментальное значение. Он показывает, в частности, что (даже если $H_{1-2} \equiv 0$) энергия двух поляронов, взаимодействующих с колебаниями решетки, ни в коем случае не равна сумме энергий отдельных поляронов, так как в нее дает вклад дополнительная энергия взаимодействия W , которая зависит от расстояния между частицами. Как будет видно из (36.16), эта энергия отрицательна, т. е. благодаря взаимодействию с колебаниями решетки между частицами с одинаковыми знаками зарядов появляется сила притяжения (при противоположных зарядах эта сила станет отталкивающей). Вывод, что благодаря взаимодействию с некоторым полем между частицами возникает прямое взаимодействие, является фундаментальным для теории сверхпроводимости, которая будет обсуждаться в § 41. Из-за этого прямого взаимодействия между частицами, которое возникает благодаря полю, частицы, естественно, не могут оставаться в исходных состояниях $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$, а будут постоянно рассеиваться друг на друге. Поэтому, чтобы найти стационарное состояние для волновой функции, следует сделать подстановку

$$f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} f_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \quad (36.15)$$

Мы не будем вдаваться в подробности вывода уравнения для определения коэффициентов $c_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$, поскольку аналогия этой ситуа-

ции с § 23 (об экситонах Ванье) очевидна. Вместо этого обсудим физический смысл взаимодействия $W(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) + H_{1-2} \equiv \equiv W_{\text{полн}}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$. В качестве определенного примера мы воспользуемся константой связи g_w (35.14) для полярного кристалла. После вычисления (36.13), которое проводится заменой суммы на интеграл, получаем (где $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| = r$)

$$W_{\text{полн}}(r) = - \underbrace{\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \frac{e^2}{r} \left\{ 1 - \frac{1}{2} (e^{-u_1 r} + e^{-u_2 r}) \right\}}_W + \underbrace{\frac{e^2}{\varepsilon_\infty r}}_{H_{1-2}}, \quad (36.16)$$

$$\text{где } u_j = \left(\frac{2m_j^* \omega}{\hbar} \right)^{1/2}. \quad (36.17)$$

Вначале рассмотрим предельный случай очень большого расстояния $r \rightarrow \infty$. Тогда экспоненциальными функциями в (36.16) можно пренебречь, в результате чего $W_{\text{полн}}$ принимает более простой вид

$$W_{\text{полн}} = \frac{e^2}{\varepsilon_0 r}. \quad (36.18)$$

В этом случае взаимодействие между поляронами принимает в точности вид взаимодействия двух точечных зарядов в статически поляризованной решетке ($\varepsilon_0 = \varepsilon_{\text{статич}}$). Обе частицы движутся столь медленно, что успевают полностью установиться поляризация решетки. Как следует из разложения (35.17),

$$E_{\mathbf{k}}^{(j)} = - \hbar \omega \alpha_j + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_j^*}, \quad (36.19)$$

т. е. оба электрона имеют поляронные массы m^{**} и собственные энергии $-\hbar \omega \alpha_j$. Если же, напротив, устремить $r \rightarrow 0$, то главные вклады в $W_{\text{полн}}$ дают члены

$$W_{\text{полн}}(r) = - \hbar \omega \alpha_1 - \hbar \omega \alpha_2 + \frac{e^2}{\varepsilon_\infty r}. \quad (36.20)$$

Уравнения (36.18) и (36.19) дают правильные результаты для больших расстояний r между частицами. При малых расстояниях поведение взаимодействия с достаточно хорошим приближением описывается (36.16), однако, приведенный выше метод не учитывает, что при малых расстояниях может проявляться масса «голой» частицы. (Как уже отмечалось, при малых расстояниях обе частицы могут двигаться столь быстро, что ионы не успевают следовать за ними.) Однако из-за недостатка места

у нас нет возможности обсудить более точные методы, вроде уже упоминавшегося в § 35 метода интегралов по траекториям Фейнмана.

Приведенные выше аргументы легко можно распространить на случай, когда обе частицы (поляроны) имеют противоположные заряды, что действительно имеет место для экситонов. В этом случае знак перед $W_{\text{полн}}$ следует изменить на противоположный, так что в результате получается $-W_{\text{полн}}$. Следствием этого является то обстоятельство, что при малых расстояниях r собственно-энергетические члены в (36.19) компенсируются постоянными членами, возникающими из-за взаимодействия (см. (36.20), однако с противоположным знаком). При малых расстояниях между электроном и дыркой ионы не могут следовать за ними достаточно быстро, так что возникают лишь малые поляризационные эффекты.

Для некоторых экситонных спектров на эксперименте можно достаточно отчетливо установить существование перехода от кулоновского взаимодействия с ϵ_{∞} при малых радиусах экситонов к взаимодействию с ϵ_0 при больших радиусах экситонов.

Задание к § 36

С помощью волновой функции (36.6) вычислить ожидаемое значение поляризации $P(x)$ (29.23).

§ 37. Теория возмущений в координатном пространстве.
Возникновение функций Грина

В теории возмущений, которая была развита в §§ 30, 32 и 33, мы опирались на такое представление, в котором состояния электронов и квантов звука описываются с помощью волновых векторов \mathbf{k} и \mathbf{w} . Соответственно этому мы пользовались операторами рождения и уничтожения вида

$$a_{\mathbf{k}}^+, a_{\mathbf{k}}, \quad b_{\mathbf{w}}^+, b_{\mathbf{w}}.$$

В этом параграфе будет показано, что теорию возмущений можно сделать существенно более наглядной, если представлять себе электроны и кванты звука определенным образом локализованными. Для этого напомним читателю (см. § 13), что рождение электрона в точке \mathbf{x} можно представить с помощью действия оператора $\psi^+(\mathbf{x})$ на вакуумное состояние Φ_0 . Поэтому в последующем изложении для вычисления по возмущениям в качестве начального состояния будем пользоваться функцией

$$\Phi(0) = \psi^+(\mathbf{x})\Phi_0. \quad (37.1)$$

Кажется разумным попробовать развить теорию возмущений только с помощью операторов

$$\psi^+(\mathbf{x}), \quad \psi(\mathbf{x}).$$

Как мы сейчас увидим, «в принципе» это возможно, однако нам все же следует сделать $\psi^+(\mathbf{x})$, $\psi(\mathbf{x})$ операторами, зависящими от времени; в предыдущих параграфах теория возмущений была сформулирована с помощью представления взаимодействия (§ 16).

При переходе от шредингеровского представления к представлению взаимодействия все операторы, а следовательно и $\psi^+(\mathbf{x})$, должны быть преобразованы с помощью невозмущенного оператора Гамильтона H_0 (см. § 16):

$$\left| \psi_0^+(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \psi^+(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}, \quad (37.2) \right.$$

откуда и появляется зависящий от времени оператор $\psi_0^+(\mathbf{x}, t)$.

Индекс 0 у оператора $\psi_0^+(\mathbf{x}, t)$ указывает на то, что $\psi^+(\mathbf{x})$ преобразован с помощью оператора H_0 .

Если разложить $\psi^+(\mathbf{x})$ по плоским волнам, то для (37.2) получим

$$\psi_0^+(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} a_{\mathbf{k}}^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (37.3)$$

(V — объем нормировки). Стоящее в этом разложении преобразование операторов $a_{\mathbf{k}}^+$ уже было вычислено в § 16:

$$e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} a_{\mathbf{k}}^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} = a_{\mathbf{k}}^+ e^{i\epsilon_{\mathbf{k}} t},$$

так что окончательно получается следующий результат:

$$\psi_0^+(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} a_{\mathbf{k}}^+ e^{i\epsilon_{\mathbf{k}} t}. \quad (37.4)$$

Эрмитово сопряженный (37.4) оператор имеет вид

$$\psi_0(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} a_{\mathbf{k}} e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}} t}. \quad (37.5)$$

Поскольку в начальный момент времени $t=0$ оператор $\psi_0^+(\mathbf{x}, t)$ переходит в оператор $\psi^+(\mathbf{x})$, мы представим начальное состояние (37.1) в виде

$$|\Phi(0) = \psi_0^+(\mathbf{x}_a, 0) \Phi_0, \quad (37.6)$$

где \mathbf{x} заменено на \mathbf{x}_a *), чтобы подчеркнуть, что \mathbf{x}_a являются начальными координатами частиц.

Функция (37.6) в последующем изложении при исследовании взаимодействия между полем электронов и полем колебаний решетки будет служить нам в теории возмущений в качестве начального состояния. Для того чтобы не перегружать с самого начала наше рассмотрение, будем рассматривать колебания решетки как классическое поле. Тогда гамильтониан взаимодействия принимает вид (см. (29.32))

$$\tilde{H}_{\text{вз}} = C \int \frac{1}{\sqrt{V}} \underbrace{\sum_{\mathbf{k}''} a_{\mathbf{k}''}^+ e^{-i\mathbf{k}''\mathbf{x} + i\epsilon_{\mathbf{k}''} t}}_{\psi_0^+(\mathbf{x}, t)} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x} - i\epsilon_{\mathbf{k}'} t}}_{\psi_0(\mathbf{x}, t)} Q_0(\mathbf{x}, t) d^3x. \quad (37.7)$$

С помощью определений (37.4) и (37.5) суммы по \mathbf{k}'' и \mathbf{k}' в (37.7) можно выразить, как указано, через ψ_0^+ и ψ_0 . Оператор

*) Индексы «a» и «e», встречающиеся в этом параграфе, происходят от немецких слов «Anfang» — «начало» и «Ende» — «конец» соответственно. (Прим. перев.)

взаимодействия, таким образом, можно представить в более простом виде

$$\tilde{H}_{\text{вз}} = C \int \psi_0^+(x, t) \psi_0(x, t) Q_0(x, t) d^3x, \quad (37.8)$$

где под Q_0 следует понимать некоторую числовую функцию. Если теперь перейти к теории возмущений, то оператором взаимодействия (37.8) следует подействовать на начальное состояние (37.6). Если получившееся выражение прочитать справа налево, то первым будет стоять выражение

$$\psi_0(x, t) \psi_0^+(x_a, 0) \Phi_0. \quad (37.9)$$

Ниже это выражение будет вычислено в общем случае, когда оператор $\psi_0^+(x_a, 0)$ заменен на $\psi_0^+(x_a, t_a)$. Если учесть, что Φ_0 является начальным состоянием, а ψ_0 состоит только из операторов уничтожения $a_{\mathbf{k}}$, так что $\psi_0(x, t)\Phi_0 = 0$, то (37.9) можно представить в виде

$$\{\psi_0(x, t) \psi_0^+(x_a, t_a) + \psi_0^+(x_a, t_a) \psi_0(x, t)\} \Phi_0. \quad (37.10)$$

Как сейчас будет показано, выражение в фигурных скобках является числовой функцией, хотя ψ_0 и ψ_0^+ являются операторами. Поэтому мы полагаем

$$(37.10) = iG_0(x, t; x_a, t_a)\Phi_0. \quad (37.11)$$

Чтобы получить явное выражение для G_0 , подставим в (37.10) разложения (37.4) и (37.5):

$$\begin{aligned} G_0(x, t; x_a, t_a) &= \\ &= -i \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}'x - i\varepsilon_{\mathbf{k}'}t} e^{-i\mathbf{k}x_a + i\varepsilon_{\mathbf{k}}t_a} \underbrace{\{a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^+ + a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'}\}}_{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}. \end{aligned} \quad (37.12)$$

Тогда, учитывая также перестановочные соотношения для ферми-частиц, получаем

$$G_0(x, t; x_a, t_a) = -i \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}(x-x_a) - i\varepsilon_{\mathbf{k}}(t-t_a)}. \quad (37.13)$$

При $t = t_a$ (37.13) переходит, как очевидно, в δ -функцию;

$$G_0(x, t_a; x_a, t_a) = -i \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}(x-x_a)} = -i\delta(x-x_a). \quad (37.14)$$

При $t < t_a$ мы положим по определению

$$G_0 = 0. \quad (37.15)$$

Используя результат (37.11), получаем

$$\frac{1}{i\hbar} \tilde{H}_{\text{вз}} \Phi(0) = \frac{C}{\hbar} \int \psi_0^+(x, t) Q_0(x, t) \Phi_0 G_0(x, t; x_a, 0) d^3x. \quad (37.16)$$

Это выражение можно интерпретировать следующим образом. В начальный момент времени электрон вылетает из точки x_a и попадает в точку x к моменту времени t , где происходит взаимодействие (рис. 52).

Полученные выше результаты мы используем, чтобы в рамках первого порядка теории возмущений более точно задать функцию состояния. Согласно предыдущему эта функция имеет вид (формула (30.7))

$$\tilde{\Phi}(t) = \Phi(0) + \int_0^t \frac{1}{i\hbar} \tilde{H}_{вз}(\tau) d\tau \Phi(0). \quad (37.17)$$

Рис. 52. Функция Грина $G_0(x, t; x_a, t_a)$ описывает пространство свободного электрона из точки x_a, t_a в точку x, t .

Это выражение с учетом только что полученного результата (37.16) и функции начального состояния (37.6) принимает вид

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}(t) = & \psi_0^+(x_a, 0) \Phi_0 + \\ & + \frac{C}{\hbar} \int_0^t \int d^3x Q_0(x, \tau) \psi_0^+(x, \tau) \Phi_0 G_0(x, \tau; x_a, 0). \end{aligned} \quad (37.18)$$

Мы только что видели, что распространение электрона можно очень наглядно представить с помощью функции G_0 , поэтому представляется естественным выразить всю правую часть (37.18) через G_0 , что может быть достигнуто умножением обеих частей (37.18) на

$$\langle \psi_0^+(x_e, t_e) \Phi_0 |. \quad (37.19)$$

Тогда сразу получаем

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \psi_0(x_e, t_e) | \tilde{\Phi}(t) \rangle = & iG_0(x_e, t_e; x_a, 0) + \\ & + i \int_0^t \int G_0(x_e, t_e; x, \tau) \frac{C}{\hbar} Q_0(x, \tau) G_0(x, \tau; x_a, 0) d^3x d\tau. \end{aligned} \quad (37.20)$$

Правая часть этого уравнения интерпретируется очень просто. Первое слагаемое в правой части (37.20) описывает невозмущенное распространение свободного электрона из $x_a, t_a = 0$ в x_e, t_e . Второй член представляет распространение электрона из $x_a, t_a = 0$ в x, τ . В этой точке происходит взаимодействие с колебаниями решетки. Затем частица распространяется из точки x, τ в точку x_e, t_e (рис. 53).

На первый взгляд кажется совсем не просто узнать, какая информация заключена во всем этом результате. Информацию,

содержащуюся в функции G_0 , которую называют функцией Грина, мы подробно рассмотрим в следующем параграфе. Здесь стоит лишь упомянуть, что мы, естественно, сразу же вернемся к привычному по предыдущим параграфам представлению (разложению по функциям $a_k^+ \Phi_0$), если совершить фурье-преобразование уравнения (37.20) по координате x_e и умножить его на $e^{-i\epsilon k t_e}$.

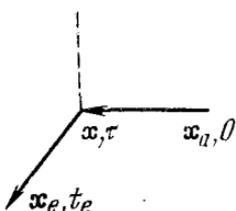


Рис. 53. Диаграмма, соответствующая уравнению (37.20): рассеяние электрона на потенциале $\sim Q_0(x, \tau)$ (— — —).

Тем самым видно, что из (37.20) можно «вытянуть» всю ту информацию, которую мы получили ранее в теории возмущений.

Мы еще раз поясним применение этого нового способа описания на примере *второго порядка теории возмущений*, приняв теперь, что колебания решетки также квантованы. Для того чтобы сразу же воспользоваться только что полученными результатами, общее основное состояние системы «электрон + колебания решетки» целесообразно разложить

на произведение отдельных состояний

$$\Phi_0 = \Phi_{0,эл} \Phi_{0,р}. \quad (37.21)$$

Далее, в качестве начального состояния мы выберем состояние, в котором имеется электрон в точке x_a и *совсем нет* квантов колебаний решетки. Эту начальную функцию (см. (37.6)) можно, учитывая (37.21), разложить в произведение

$$\Phi(0) = (\psi_0^+(x_a, 0) \Phi_{0,эл}) \Phi_{0,р}, \quad (37.22)$$

так что ψ_0^+ относится только к $\Phi_{0,эл}$. Подействуем теперь на функцию (37.22) (во втором порядке теории возмущений) оператором

$$\left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_1) d\tau_1 + \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_2) \int_0^{\tau_2} \tilde{H}_{вз}(\tau_1) d\tau_1 d\tau_2 \right). \quad (37.23)$$

Умножим результат по аналогии с (37.20) слева на функцию

$$\tilde{\Phi}_0^+(t_e) = (\psi_0^+(x_e, t_e) \Phi_{0,эл} \Phi_{0,р})^+ \quad (37.24)$$

и образуем среднее значение. Обсудим получившиеся члены по отдельности:

$$I \rightarrow \langle \tilde{\Phi}_0(t_e) | \Phi(0) \rangle \equiv iG(x_e, t_e; x_a, 0), \quad (37.25)$$

$$II \rightarrow \frac{1}{i\hbar} \left\langle \tilde{\Phi}_0(t_e) \left| \int_0^t \tilde{H}_{вз}(\tau_1) d\tau_1 \Phi(0) \right. \right\rangle. \quad (37.26)$$

Как видно из (37.8), оператор $\tilde{H}_{\text{вз}}(t)$ содержит выражение $Q_0(\mathbf{x}, t)$, которое теперь является оператором.

Используя (29.32) и (29.33), разложим Q_0 следующим образом:

$$Q_0(\mathbf{x}, t) = Q_0^+(\mathbf{x}, t) + Q_0^-(\mathbf{x}, t), \quad (37.27)$$

где использованы сокращенные обозначения

$$Q_0^+(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{w}} i \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma_{\mathbf{w}} V}} w e^{i\mathbf{w}\mathbf{x}} e^{-i\omega_{\mathbf{w}} t} b_{\mathbf{w}}, \quad (37.28)$$

$$Q_0^-(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{w}} (-i) \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma_{\mathbf{w}} V}} w e^{-i\mathbf{w}\mathbf{x}} e^{i\omega_{\mathbf{w}} t} b_{\mathbf{w}}^+. \quad (37.29)$$

То, что операторам уничтожения поставлен в соответствие оператор Q^+ , не является опечаткой, а связано с определением, применяемым в квантовополевой теории, согласно которому через Q^+ должен обозначаться оператор, содержащий положительные частоты. А поскольку во всех волновых функциях квантовой механики энергия присутствует в виде $e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \equiv e^{-i\omega t}$, то и (37.28) действительно связано с положительной частотой.

Поскольку стоящие в (37.26) функции состояния представляют вакуумное состояние решетки и, кроме того, Q_0 зависит от $b_{\mathbf{w}}$, $b_{\mathbf{w}}^+$ только линейно, то (37.26) исчезает:

$$II \rightarrow (37.26) = 0. \quad (37.30)$$

Таким образом, интересный для нас член в (37.23) — это III. С помощью (37.8) перепишем этот член в виде

$$\left(-\frac{i}{\hbar} C\right)^2 \left\langle \Phi_0(t_e) \left| \int_0^t \int d\tau_2 d^3x_2 Q_0(\mathbf{x}_2, \tau_2) \dots \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \dots \int_0^{\tau_2} \int d\tau_1 d^3x_1 Q_0(\mathbf{x}_1, \tau_1) \dots \Phi(0) \right\rangle, \quad (37.31)$$

где точки обозначают пока еще отсутствующие операторы ψ^+ , ψ . При учете (37.22) и (37.24) выражение (37.31) распадается на часть, относящуюся к решетке, и часть, относящуюся к электронам. Рассмотрим в явном виде существенно новую для нас решеточную часть

$$\langle \Phi_{0, \mathbf{p}} | Q_0(\mathbf{x}_2, \tau_2) Q_0(\mathbf{x}_1, \tau_1) \Phi_{0, \mathbf{p}} \rangle. \quad (37.32)$$

Это выражение мы обозначим через

$$D(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1). \quad (37.33)$$

Если теперь для стоящих в Q_0 операторов $b_{\mathbf{w}}^+$, $b_{\mathbf{w}}$ воспользоваться бозевскими перестановочными соотношениями, то вычисление

(37.32) проводится аналогично (37.12) и в результате получаем

$$D(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) = \sum_{\mathbf{w}} \frac{\hbar w^2}{2\gamma\omega_{\mathbf{w}}V} e^{i\mathbf{w}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)} e^{-i\omega_{\mathbf{w}}(t_2 - t_1)}. \quad (37.34)$$

Это выражение мы будем интерпретировать как волновую функцию, которая описывает распространение фонона из точки \mathbf{x}_1, t_1 в точку \mathbf{x}_2, t_2 . Графически процесс распространения этого фонона мы представляем с помощью волнистой линии (рис. 54).

Рис. 54. Функция Грина $D(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1)$ описывает распространение фонона из точки \mathbf{x}_1, t_1 в точку \mathbf{x}_2, t_2 .

Теперь нам следует вычислить ту часть выражения в (37.34), которая относится к электронам:

$$\langle \Phi_{0,эл} | \psi_0(\mathbf{x}_e, t_e) \psi_0^\dagger(\mathbf{x}_2, \tau_2) \psi_0(\mathbf{x}_2, \tau_2) \psi_0^\dagger(\mathbf{x}_1, \tau_1) \times \\ \times \psi_0(\mathbf{x}_1, \tau_1) \psi_0^\dagger(\mathbf{x}_a, 0) \Phi_{0,эл} \rangle. \quad (37.35)$$

Так как вычисление проводится аналогично вычислениям на стр. 269—271, то явное вычисление мы предоставляем читателю и сразу приводим результат

$$(37.35) = i^3 G_0(\mathbf{x}_e, t_e; \mathbf{x}_2, \tau_2) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_a, 0). \quad (37.36)$$

После этой подготовки мы в состоянии привести конечный результат. Используя (37.36) и (37.32) = (37.33) в (37.31) и складывая затем I и III, мы получаем

$$\langle \Phi_0 | \psi_0(\mathbf{x}_e, t_e) | \tilde{\Phi}^{(2)}(t) \rangle = i G_0(\mathbf{x}_e, t_e; \mathbf{x}_a, 0) + \\ + \frac{i}{\hbar^2} \int_0^t \int d\tau_2 d^3x_2 G_0(\mathbf{x}_e, t_e; \mathbf{x}_2, \tau_2) C \int_0^{\tau_2} \int d\tau_1 d^3x_1 \times \\ \times D(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) G_0(\mathbf{x}_2, \tau_2; \mathbf{x}_1, \tau_1) C G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_a, 0). \quad (37.37)$$

Второе слагаемое в (37.37) может быть интерпретировано следующим образом: электрон распространяется из $\mathbf{x}_a, t_a = 0$ в \mathbf{x}_1, τ_1 . Там возникает взаимодействие с решеткой. Затем электрон и фонон летят из \mathbf{x}_1, τ_1 в \mathbf{x}_2, τ_2 . Наконец, имеет место еще одно взаимодействие, в результате которого фонон уничтожается и электрон летит из \mathbf{x}_2, τ_2 в \mathbf{x}_e, t_e (рис. 55). Поскольку функции G_0 и D должны быть вычислены явно (см. задание), то вычисление (37.37) сводится к ряду интегрирований по пространству и времени.

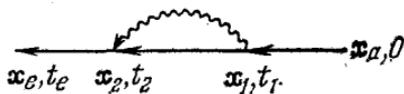


Рис. 55. Диаграмма, соответствующая уравнению (37.37): вклад в собственную энергию электрона.

Приведенные выше соображения могут быть распространены, естественно, на возмущения любого, сколь угодно высокого порядка. Для этого, очевидно, следует выписать все соответствующие вычисления по теории возмущений диаграммы, каждой вершине и каждой электронной и фононной линии которых отвечает определенное правило. С этими правилами мы только что познакомились. Диаграммная техника образует фундамент многих современных теорий физики твердого тела.

Задание к § 37

Переходя к пределу $V \rightarrow \infty$ вычислить $G_0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', 0)$.

§ 38. Функция распространения, пропагатор, функция Грина — все одно и то же

Обратимся к результатам предыдущего параграфа. Мы видели там, что каждый шаг теории возмущений можно интерпретировать совершенно наглядным образом, если представить себе, что частицы распространяются в пространстве между некоторыми точками. Таким образом, мы представляли распространение свободного электрона из точки \mathbf{x}_1 в момент времени t_1 в точку \mathbf{x}_2 к моменту времени t_2 с помощью функции

$$G_0(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) = -i \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) - i\varepsilon_{\mathbf{k}}(t_2 - t_1)}, \quad (38.1)$$

которая является результатом суммирования по \mathbf{k} .

При этом в рамках теории возмущений автоматически учитывалось, что $t_2 > t_1$. Для последующего будет также необходимо определить эту функцию и для $t_2 < t_1$. Для этих моментов времени мы полагаем ее равной нулю:

$$G_0(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) = 0 \quad \text{при} \quad t_2 < t_1. \quad (38.2)$$

Представляемая выражениями (38.1) и (38.2) функция описывает распространение свободного электрона и обычно называется функцией распространения или пропагатором. Как мы уже видели, выражение (38.1) может быть также определено через операторы рождения и уничтожения: если умножить равенство (37.9) = (37.11) или, в наших теперешних обозначениях,

$$\psi_0(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_0^+(\mathbf{x}_1, t_1) \Phi_0 = iG_0(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) \Phi_0 \quad (38.3)$$

слева на $\langle \Phi_0^+ |$ то в качестве определения G_0 мы получаем

$$G_0(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) = -i \langle \Phi_0^+ | \psi_0(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_0^+(\mathbf{x}_1, t_1) \Phi_0 \rangle, \quad t_2 \geq t_1. \quad (38.4)$$

Для $t_1 > t_2$ по аналогии с выражением (38.2) полагаем снова, что $G_0(x_2, t_2; x_1, t_1) = 0$. Этот нуль мы представим, исходя из соображений, которые тотчас будут очевидны, в несколько сложном виде, а именно, сначала подействовав оператором уничтожения, а затем оператором рождения:

$$G_0(x_2, t_2; x_1, t_1) = 0 = \langle \Phi_0 | \psi_0^+(x_1, t_1) \psi_0(x_2, t_2) \Phi_0 \rangle \text{ при } t_1 < t_2. \quad (38.5)$$

В этом месте обратим внимание на одно важное свойство функции распространения, которое часто будет встречаться нам позже. В левой части уравнения (38.1) x_1 и x_2 , так же как t_1 и t_2 , стоят отдельно друг от друга. В правой же части, напротив, координаты и время всегда появляются в виде разностей $x_2 - x_1$ и $t_2 - t_1$. Это свойство является следствием пространственной трансляционной инвариантности задачи — свободная частица «видит» однородное пространство. Совершенно аналогично имеет место и временная инвариантность, поскольку на частицу не действуют никакие зависящие от времени силы.

Как мы только что видели, функцию распространения можно представить с помощью среднего значения (38.4) и (38.5). Теперь мы обобщим эту концепцию еще на целый ряд направлений. Прежде всего представим оба выражения (38.4) и (38.5) с помощью одного выражения, введя так называемый хронологический оператор Дайсона T , который имеет следующий простой смысл. Если написать этот оператор перед произведением зависящих от времени операторов, то операторы упорядочиваются справа налево в таком порядке, что операторы, относящиеся к более ранним моментам времени, всегда стоят справа от операторов, относящихся к более поздним моментам времени. Тем самым в качестве определений оператора T получаем уравнения

$$T \psi_0(x_2, t_2) \psi_0^+(x_1, t_1) = \psi_0(x_2, t_2) \psi_0^+(x_1, t_1) \text{ для } t_2 > t_1 \quad (38.6)$$

и

$$T \psi_0(x_2, t_2) \psi_0^+(x_1, t_1) = \mp \psi_0^+(x_1, t_1) \psi_0(x_2, t_2) \text{ для } t_2 < t_1. \quad (38.7)$$

Относительно знаков плюс и минус в правой части (38.7) дело обстоит следующим образом: знак минус ставится, если речь идет о фермиоператорах, а плюс — если это бозевские операторы.

Если теперь в уравнениях (38.6) и (38.7) построить среднее значение относительно вакуумного состояния, то непосредственно получится соотношение

$$\begin{aligned} & -i \langle \Phi_0 | T \psi_0(x_2, t_2) \psi_0^+(x_1, t_1) | \Phi_0 \rangle = \\ & = \begin{cases} -i \langle \Phi_0 | \psi_0(x_2, t_2) \psi_0^+(x_1, t_1) | \Phi_0 \rangle & \text{при } t_2 > t_1, \\ \pm i \langle \Phi_0 | \psi_0^+(x_1, t_1) \psi_0(x_2, t_2) | \Phi_0 \rangle & \text{при } t_2 < t_1. \end{cases} \quad (38.8) \end{aligned}$$

Тем самым мы достигли своей цели — представить соотношения (38.4) и (38.5) одним выражением. Функция (38.8) допускает многие обобщения. Нам нет необходимости полагать, что свободная частица добавляется к вакууму. Мы можем, например, представить себе, что в кристалле распространяется электрон, добавленный к уже имеющимся, скажем, избыточной электрон в полупроводнике. На этом основании функцию Φ_0 , вообще говоря, можно заменить вектором состояния Φ , описывающим новую физическую ситуацию. Точно так же при распространении частицы вовсе не необходимо, чтобы это была непременно частица без взаимодействия. Более того, наиболее интересный случай возникает именно тогда, когда частица находится во взаимодействии с окружением, как, например, электрон с колебаниями решетки (в особенности поляроны), или когда электрон взаимодействует с другими электронами кристалла. При этом следует, естественно, заменить оператор свободной частицы H_0 на полный оператор Гамильтона с взаимодействием H и, таким образом, в самом общем случае определить зависящие от времени операторы уничтожения в представлении Гейзенберга:

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} H t}. \quad (38.9)$$

Тогда получаем следующее определение функции Грина:

$$| G(x_2, t_2; x_1, t_1) = -i \langle \Phi | T \psi(x_2, t_2) \psi^\dagger(x_1, t_1) \Phi \rangle. \quad (38.10)$$

Эта и родственные ей функции приобрели в современной теории твердого тела очень важное значение, и в последующем изложении на некоторых сравнительно простых примерах мы покажем, почему функции Грина так важны и что можно описать с их помощью.

Если задача обладает пространственной и временной инвариантностью, то функция (38.10) зависит не от отдельных аргументов x_1, x_2, t_1, t_2 , а, как уже было отмечено выше, от соответствующих разностей

$$x_2 - x_1 = x, \quad t_2 - t_1 = t. \quad (38.11)$$

При этих предположениях функция Грина становится функцией только x и t :

$$G(x_2, t_2; x_1, t_1) = G(x, t). \quad (38.12)$$

Далее, мы будем действовать следующим образом:

1. Сначала поясним, какая информация содержится в G или, выражаясь проще, почему физики-теоретики вообще занимаются функцией Грина G .

2. В следующем параграфе мы установим уравнение для G и продемонстрируем полезность функции Грина G .

Информативность функции Грина G . Вновь начнем с примера свободной частицы. Как мы уже видели, функция Грина в

этом случае дается следующим явным выражением:

$$G(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} -i \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\varepsilon_{\mathbf{k}}t} & \text{при } t \geq 0, \\ 0 & \text{при } t < 0. \end{cases} \quad (38.13)$$

Определение (38.13) представляет разложение $G(\mathbf{x}, t)$ по плоским волнам, т. е. пространственное преобразование Фурье. Соответствующие фурье-коэффициенты мы обозначим через $G_{\mathbf{k}}(t)$:

$$G(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \right) G_{\mathbf{k}}(t). \quad (38.14)$$

При этом функция $G_{\mathbf{k}}(t)$ представляет собой совершенно иную функцию, нежели $G(\mathbf{x}, t)$. Поэтому читателю следует обращать особое внимание на аргументы \mathbf{x} и \mathbf{k} . Сравнение (38.14) с (38.13) показывает, что $G_{\mathbf{k}}(t)$ дается выражением

$$G_{\mathbf{k}}(t) = \begin{cases} -ie^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}}t} & \text{при } t \geq 0, \\ 0 & \text{при } t < 0. \end{cases} \quad (38.15)$$

Естественно, здесь нет ничего нового для случая свободной частицы. Это выражение утверждает лишь, что вектору распространения \mathbf{k} свободной частицы отвечает энергия $E_{\mathbf{k}} \equiv \hbar\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Основная проблема возникает тогда, когда речь идет о частице, которая связана со своим окружением некоторым взаимодействием. В этом случае следует ожидать, что энергия первоначально свободной частицы изменяется. Кроме того, как мы видели в § 30, частица рассеивается из своего исходного состояния. Вероятность обнаружить ее в исходном состоянии при этом уменьшается.

Как выразить теперь все это с помощью функции Грина? Предположим вновь, что функция Грина $G(\mathbf{x}, t)$ разложена в ряд Фурье. Тогда фурье-коэффициенты примут следующий вид:

$$G_{\mathbf{k}}(t) = -ic_{\mathbf{k}} e^{-i\varepsilon_{\mathbf{vz}, \mathbf{k}}t - \gamma_{\mathbf{k}}t} \quad \text{при } t > 0, \quad (38.16)$$

где $E_{\mathbf{vz}, \mathbf{k}} \equiv \hbar\varepsilon_{\mathbf{vz}, \mathbf{k}}$ — энергия частицы с учетом взаимодействия, а $\gamma_{\mathbf{k}}$ — обратное время жизни частицы.

Возможно, что экстраполяция от частицы без взаимодействия, которая описывается выражением (38.15), к взаимодействующей частице, которая описывается выражением (38.16), тому или иному читателю покажется несколько смелой. Однако на примере конкретной модели мы покажем, что G действительно имеет такую структуру.

До сих пор мы познакомились с функциями Грина двух типов, а именно, зависящих от координат и времени и зависящих от волнового вектора \mathbf{k} и времени. Можно сделать еще один шаг

и провести преобразование Фурье по времени. Это преобразование определяется следующим образом:

$$G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\varepsilon t} G_{\mathbf{k}}(t) dt. \quad (38.17)$$

Мы вычислим этот фурье-образ для частного случая (38.16) и после проведения интегрирования получим

$$G_{\mathbf{k}}(\varepsilon) = c_{\mathbf{k}} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\gamma}. \quad (38.18)$$

Таким образом, (38.18) является пространственным и временным фурье-образом исходной функции Грина $G(\mathbf{x}, t)$. Эта функция Грина, рассматриваемая как функция \mathbf{k} и ε (причем ε имеет размерность частоты), довольно часто встречается в литературе и служит поводом к введению совершенно новой терминологии. Рассмотрим функцию (38.18) для фиксированного \mathbf{k} , т. е. для определенного вектора распространения, но для переменного ε ! Поскольку знаменатель (38.18) является комплексной величиной, то функцию $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ имеет смысл рассматривать на комплексной ε -плоскости. Как функция аргумента ε , (38.18) имеет на комплексной плоскости один полюс. Действительная координата этого полюса равна $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, а мнимая — обратному времени жизни $-\gamma$ (рис. 56). Тогда мы приходим к фундаментальной интерпретации: полюс или, возможно, полюсы функции Грина $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ определяют энергию и время жизни частицы при ее взаимодействии с окружением. Поскольку при этом взаимодействии может возникнуть совершенно новое возбужденное состояние, которое имеет мало общего с исходным состоянием свободной частицы, то говорят о рождении квазичастицы. На самом деле это понятие следует трактовать еще шире. Возможны случаи (например, плазмоны; см. § 27), при которых вовсе не требуется введения в систему дополнительной частицы, чтобы создать возбужденное состояние, которое выглядит так, как будто через систему движется своего рода частица. Простейший пример — фонон, который распространяется в решетке как квант возбуждения, — встречался нам уже в § 8.

Заметим также, что функцию $G_{\mathbf{k}}(t)$ можно определить прямо, не пользуясь обходным путем через фурье-преобразование исходной функции Грина $G(\mathbf{x}, t)$. Мы утверждаем, что это делается

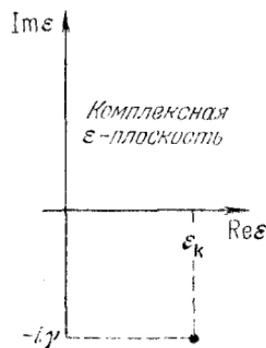


Рис. 56. Полюсы функции Грина $G_{\mathbf{k}}(\varepsilon)$ на комплексной ε -плоскости (ε — энергия).

следующим образом:

$$| G_{\mathbf{k}}(t) = -i \langle \Phi | T a_{\mathbf{k}}(t) a_{\mathbf{k}}^{\dagger}(0) \Phi \rangle. \quad (38.19)$$

Доказательство проводится легко, если разложить $\psi^+(\mathbf{x}, t)$, $\psi(\mathbf{x}, t)$ по плоским волнам, т. е., например,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}(t) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}.$$

Подробности вычисления мы предоставляем читателю в качестве упражнения.

§ 39. Примеры уравнений для функций Грина и их решение

В этом параграфе мы приведем два примера, чтобы показать, как выглядят уравнения для функций Грина и какие обычно делаются приближения для их решения.

Первый пример связан с проблемой многих электронов в физике твердого тела, а второй — с взаимодействием электрона с колебаниями решетки, т. е., в частности, с поляроном.

Пример 1. Уравнение для функции Грина проблемы многих электронов. Наша задача состоит в том, чтобы вывести уравнение для функции Грина, которая определена в координатном представлении следующим образом:

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i \langle \Phi | T \psi(\mathbf{x}, t) \psi^+(\mathbf{x}', t') \Phi \rangle$$

(см. (38.10)). Самый простой путь — это установить связь с уравнением движения для оператора уничтожения $\psi(\mathbf{x}, t)$. Для оператора Гамильтона проблемы многих электронов (см. (20.1)) мы уже ввели в § 16 уравнение движения для оператора уничтожения (см. (A 16.15)). Чтобы в последующем изложении не тащить за собой слишком большое число членов и, кроме того, с самого начала учесть трансляционную инвариантность проблемы, мы опускаем решеточный потенциал $V(\mathbf{x})$ и считаем, что это оправдано введением эффективной массы (см. § 18).

Итак, в основу рассмотрения кладется следующее уравнение движения:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right\} \psi(\mathbf{x}, t) + \int \psi^+(\mathbf{x}'', t) \frac{e^2}{|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}|} \times \\ \times \psi(\mathbf{x}'', t) \psi(\mathbf{x}, t) d^3x''. \quad (39.1)$$

Умножим уравнение (39.1) справа на оператор $\psi^+(\mathbf{x}', t')$, подействуем слева хронологическим оператором T и образуем среднее значение относительно состояния Φ (которое пока нет нужды

уточнять более подробно). Тогда получим

$$\begin{aligned}
 i\hbar \left\langle \Phi \left| T \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \psi^+(\mathbf{x}', t') \Phi \right\rangle = \\
 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{\mathbf{x}} \langle \Phi | T \psi(\mathbf{x}, t) \psi^+(\mathbf{x}', t') \Phi \rangle + \\
 + \int \frac{e^2}{|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}|} \langle \Phi | T \psi^+(\mathbf{x}'', t) \psi(\mathbf{x}'', t) \psi(\mathbf{x}, t) \psi^+(\mathbf{x}', t') \Phi \rangle d^3 x''.
 \end{aligned} \tag{39.2}$$

Чтобы получить уравнение движения для функции Грина, нам следует, естественно, вынести производную по времени d/dt и поставить ее перед средним значением. Однако здесь таится некая сложность, о которую можно легко споткнуться. Чтобы не стать жертвой этой сложности, мы запишем $G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ в таком виде, что хронологический оператор T окажется выраженным с помощью «обычной» числовой функции. Для этого воспользуемся ступенчатой функцией $\Theta(t - t')$, которая, как известно, определяется следующим образом:

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{при } t > t', \\ 0 & \text{при } t < t'. \end{cases} \tag{39.3}$$

Тогда T -произведение можно сформулировать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 T\psi(\mathbf{x}, t)\psi^+(\mathbf{x}', t') = \psi(\mathbf{x}, t)\psi^+(\mathbf{x}', t')\Theta(t - t') \mp \\
 \mp \psi^+(\mathbf{x}', t')\psi(\mathbf{x}, t)\Theta(t' - t).
 \end{aligned} \tag{39.4}$$

При этом знак минус относится к ферми-операторам ψ , а знак плюс следует использовать для бозе-операторов.

Как показывает сравнение с определением оператора T (см. (38.6, 7)), выражения (39.4) и (38.6, 7) действительно совпадают. Чтобы от (39.4) перейти к правилу вычисления производной по времени функции G , построим с обеих сторон (39.4) среднее значение относительно функции Φ , умножим на $(-i)$ и продифференцируем по времени t :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i \left\{ \left\langle \Phi \left| \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \psi^+(\mathbf{x}', t') \Phi \right\rangle \Theta(t - t') \mp \right. \\
 \mp \left\langle \Phi \left| \psi^+(\mathbf{x}', t') \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \Phi \right\rangle \Theta(t' - t) + \right. \\
 \left. + \left\langle \Phi \left| \psi(\mathbf{x}, t) \psi^+(\mathbf{x}', t') \Phi \right\rangle \frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t') \mp \right. \\
 \left. \mp \left\langle \Phi \left| \psi^+(\mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}, t) \Phi \right\rangle \frac{\partial}{\partial t} \Theta(t' - t) \right\}.
 \end{aligned} \tag{39.5}$$

Используя T -оператор, запишем два первых члена в (39.5) в виде

$$-i \left\langle \Phi \left| T \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \psi^+(\mathbf{x}', t') \right| \Phi \right\rangle. \quad (39.6)$$

Для преобразования обоих последних выражений в (39.5) мы воспользуемся известным из математики фактом, что производная ступенчатой функции дает δ -функцию:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t') = \delta(t - t'), \quad \frac{\partial}{\partial t} \Theta(t' - t) = -\delta(t - t'). \quad (39.7)$$

После сложения два последних слагаемых в (39.5) принимают следующий вид:

$$-i \langle \Phi | \{ \psi(\mathbf{x}, t) \psi^+(\mathbf{x}', t') \pm \psi^+(\mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}, t) \} | \Phi \rangle \delta(t - t'). \quad (39.8)$$

Выражение в фигурных скобках в (39.8), однако, представляет собой антикоммутатор (ферми-частицы) или коммутатор (бозе-частицы) между ψ и ψ^+ . Поскольку за ним стоит функция $\delta(t - t')$, мы можем оба времени t и t' положить равными. Тогда фигурная скобка превращается, согласно обычным перестановочным соотношениям (13.8) и (12.15), в обычную δ -функцию $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$. Поскольку оставшееся среднее значение $\langle \Phi | \Phi \rangle$ из-за нормировки Φ равно единице, то (39.8) принимает простой вид

$$-i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \quad (39.9)$$

Если сложить два первых члена (39.5), которые даются выражением (39.6), с двумя последними членами (39.5), которые даются выражением (39.9), то окончательно получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \\ = -i \left\langle \Phi \left| T \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \psi^+(\mathbf{x}', t') \right| \Phi \right\rangle - i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (39.10)$$

Возвратимся теперь к нашему исходному уравнению (39.2). Умножив обе его стороны на $(-i)$ и подставив в левую часть (39.10), получим окончательное уравнение

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \hbar \delta(t' - t) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - \\ - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') - \\ - i \int \frac{e^2}{|\mathbf{x}'' - \mathbf{x}|} G(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}'', t - 0; \mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') d^3x''. \end{aligned} \quad (39.11)$$

Здесь сразу введено сокращенное обозначение

$$\left\{ \begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \mathbf{x}_4, t_4) = \\ = \langle \Phi | T \psi^+(\mathbf{x}_1, t_1) \psi(\mathbf{x}_2, t_2) \psi(\mathbf{x}_3, t_3) \psi^+(\mathbf{x}_4, t_4) \Phi \rangle. \end{aligned} \right. \quad (39.12)$$

Поскольку мы применили в (39.11) хронологический оператор, а в уравнении (39.11), однако, должны пользоваться равными временами $t_1 = t_2 = t$, то, чтобы обеспечить правильный порядок следования операторов ψ^+ , ψ , в аргументе мы написали $t - 0$. В уравнении (39.11) кроется глубокое разочарование для теоретика, который полагает решить эту задачу с помощью функции Грина. Первоначально мы хотели ввести уравнение для функции Грина $G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$. Однако это удалось нам лишь частично, поскольку мы вынужденным образом пришли к введению еще более сложной функции Грина (39.12). Для нее вновь следует ввести уравнение, что в принципе возможно сделать. Но это новое уравнение будет содержать функцию Грина, в которой появятся шесть операторов. Эту процедуру можно продолжить, в результате чего получится последовательность уравнений, решение которой определено не проще, нежели решение исходной задачи. Поэтому следует обратиться к приближениям. Прежде чем обсудить этот путь, мы рассмотрим точно решаемый пример¹⁾.

Свободные частицы без кулоновского взаимодействия. В этом случае последний член в (39.11) выпадает, так что уравнение принимает следующий вид:

$$\frac{\partial G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m^*} \Delta_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') - i\delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (39.13)$$

Поскольку неоднородный член этого уравнения зависит только от разности координат $\sim \delta(t - t')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, мы полагаем

$$G = G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t'). \quad (39.14)$$

Для решения представим G в виде интеграла Фурье:

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int \tilde{G}(\mathbf{k}, \varepsilon) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - i\varepsilon(t - t')} d^3k d\varepsilon. \quad (39.15)$$

Аналогично разложим функцию $\delta(t - t')\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ в интеграл Фурье:

$$\delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int \int e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - i\varepsilon(t - t')} d^3k d\varepsilon. \quad (39.16)$$

¹⁾ Читатель, не достаточно глубоко знающий математику (преобразование Фурье, теорему о вычетах), этот пример может спокойно опустить и читать дальше, начиная со стр. 285.

Оба выражения подставим в (39.13). Учтем, что имеют место равенства

$$\frac{d}{dt} e^{-iet} = -ie e^{-iet}, \quad (39.17)$$

$$\Delta_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = -k^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \quad (39.18)$$

Перенесем все члены в (39.13) в одну сторону, после чего получим

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \iint e^{i(\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-\varepsilon(t-t'))} \left\{ \tilde{G}(\mathbf{k}, \varepsilon) \left(-i\varepsilon + \frac{i\hbar}{2m^*} k^2 \right) + \right. \\ \left. + i \frac{1}{(2\pi)^2} \right\} d^3k d\varepsilon = 0 \quad (39.19)$$

Поскольку экспоненциальные функции между собой линейно независимы, то левая часть (39.19) может равняться нулю только тогда, когда обращается в нуль выражение в фигурных скобках. Это приводит к результату

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (39.20)$$

где введено сокращенное обозначение

$$\hbar\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (39.21)$$

Подставляя (39.20) в (39.15), получаем

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; t - t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \iint \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-i\varepsilon(t-t')}}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}} d^3k d\varepsilon. \quad (39.22)$$

Этот интеграл, очевидно, следует вычислять с помощью теоремы о вычетах. При этом возникает типичная для функций Грина трудность: подынтегральное выражение имеет полюс в точке $\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}}$, т. е. сингулярность на контуре интегрирования. Чтобы избавиться от этой трудности, добавим в знаменателе бесконечно малую мнимую величину $\pm i\gamma$, $\gamma > 0$, в результате чего знаменатель примет вид $1/(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\gamma)$. По причинам, которые сейчас станут понятными, мы выберем знак плюс перед $i\gamma$. Итак, рассмотрим интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\varepsilon\tau} d\varepsilon}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\gamma} \quad (\tau = t - t'). \quad (39.23)$$

Для того чтобы можно было воспользоваться теоремой о вычетах,

контур интегрирования следует замкнуть на бесконечности, причем интеграл вдоль этой части контура не должен давать вклада.

1. При $\tau = t - t' > 0$ замыкаем контур в нижней полуплоскости, тогда $\text{Im } \varepsilon < 0$, т. е. действительная часть показателя экспоненты в (39.23) $\text{Re} \{-i\varepsilon\tau\} < 0$ (рис. 57). Полюс в точке $\varepsilon = \varepsilon_k - i\gamma$ находится внутри контура интегрирования. Теорема о вычетах дает

$$\oint \frac{e^{-i\varepsilon\tau} d\varepsilon}{\varepsilon - \varepsilon_k + i\gamma} = -2\pi i e^{-i\varepsilon_k\tau - \gamma\tau} = -2\pi i e^{-i\varepsilon_k\tau}, \quad \gamma \rightarrow 0. \quad (39.24)$$

2. При $\tau = t - t' < 0$ контур интегрирования следует замкнуть в верхней полуплоскости. Тогда внутри контура нет никакого полюса, так что теорема о вычетах дает $\oint \dots = 0$. Тем самым мы удовлетворили условию

$$G(x, t; x', t') = 0 \text{ при } t < t' \quad (\text{см. 38.2}). \quad (39.25)$$

Из процедуры интегрирования (выбор знака $i\gamma$) видно, что уравнение (39.13) не включает условие (39.25), так что его следует явно ввести. Применяя (39.24) и (39.25), получаем

$$G(x - x'; t - t') = \begin{cases} \frac{-i}{(2\pi)^3} \int e^{ik(x-x') - i\varepsilon_k(t-t')} d^3k, & t > t', \\ 0, & t < t'. \end{cases} \quad (39.26)$$

Сравним теперь результат (39.26) с (38.1) и (38.2). Совершенно очевидно полное совпадение (если только учесть, что в § 38 использовался ряд Фурье, а здесь, напротив, интеграл. Это по существу вопрос объема нормировки, и он не связан ни с физикой, ни с формализмом). Несмотря на это совпадение, в нашей задаче заключена еще одна ловушка (см. задание 1).

Вернемся, однако, назад к нашему общему уравнению (39.11) с кулоновским взаимодействием.

Приближение Хартри. Для того чтобы мы могли решить уравнение (39.11), в теории функций Грина следует сделать типичное приближение, которое полностью эквивалентно первоначальному приближению Хартри (или несколько более общему приближению Хартри — Фока). Мы разложим функцию Грина, которая зависит от четырех операторов, на произведение более простых

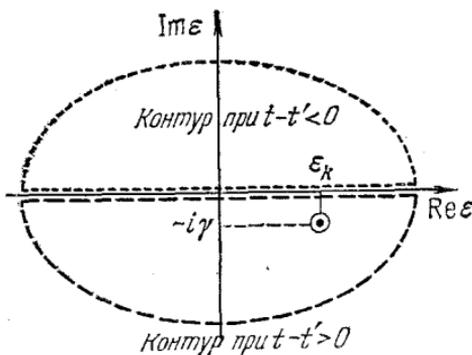


Рис. 57. К применению теоремы о вычетах.

функций Грина, т. е. представим ее в виде (приближение Хартри)

$$G(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3; x_4, t_4) = \pm G(x_2, t_2; x_1, t_1) G(x_3, t_3; x_4, t_4), \quad (39.27)$$

или, в краткой записи,

$$| G(1, 2; 3, 4) = \pm G(2, 1) G(3, 4). \quad (39.28)$$

Верхний знак относится к ферми-операторам ψ^+ , ψ , а нижний — к бозе-операторам. Подставим приближение (39.28) в уравнение (39.11). Теперь учтем еще, что

$$G^*(x, t - 0; x, t) = \pm i \langle \Phi | \psi^+(x, t) \psi(x, t) | \Phi \rangle = \pm i \rho(x, t) \quad (39.29)$$

($\rho(x, t)$ — плотность числа частиц), после чего получим

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial G(x, t; x', t')}{\partial t} = \\ = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_x + e^2 \int d^3x'' \frac{\rho(x'', t)}{|x - x''|} \right\} G(x, t; x', t') + \\ + \hbar \delta(t - t') \delta(x - x'). \quad (39.30) \end{aligned}$$

Стоящий в правой части уравнения (39.30) в фигурных скобках оператор имеет вид:

кинетическая энергия + потенциальная энергия заряда e в поле зарядовой плотности $e\rho(x, t)$.

В качестве метода решения напрашивается решение с помощью итераций (как в методе Хартри): задаем $\rho(x, t)$, затем вычисляем с помощью уравнения (39.30) G , получаем отсюда согласно уравнению (39.29) новую плотность и т. д.

Приближение Хартри — Фока. В этом случае используется следующее приближение:

$$| G(1, 2; 3, 4) = \pm G(2, 1)G(3, 4) - G(3, 1)G(2, 4). \quad (39.31)$$

Мы предоставляем читателю самому по аналогии с методом Хартри сделать подстановку приближения (39.31) в (39.11) и обсудить получившееся уравнение.

Пример 2. Взаимодействие частицы с колебаниями решетки. В предыдущем примере мы рассматривали функции Грина в координатном пространстве. Теперь введем уравнения движения для фурье-образов функций Грина. Мы ищем, таким образом, уравнение для определенной в (38.19) функции Грина $G_k(t)$. В принципе мы поступаем так же, как и в первом примере, исходя при этом из соответствующих уравнений движения операторов в гейзенберговском представлении. Для случая взаимодействия электрона с колебаниями решетки уравнение движения

Фононных операторов было уже введено в § 16. Аналогичным образом можно ввести и уравнение для электронных операторов. Поскольку эти уравнения нам сейчас потребуются, приведем их простоты ради, в явном виде

$$\dot{a}_{\mathbf{k}} = -i\varepsilon_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}} - i \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}} - i \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}, \quad (39.32)$$

$$\dot{b}_{\mathbf{w}} = -i\omega_{\mathbf{w}}b_{\mathbf{w}} - i \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}, \quad (39.33)$$

$$\dot{b}_{\mathbf{w}}^+ = i\omega_{\mathbf{w}}b_{\mathbf{w}}^+ + i \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{k}}. \quad (39.34)$$

Уравнение (39.32) является исходным при выводе уравнения для функции Грина. Далее, умножим обе стороны (39.32) справа на $a_{\mathbf{k}'}^+(t')$, а слева — на хронологический оператор T и на $(-i)$.

Образуем, наконец, среднее значение относительно состояния Φ , причем в последующем в качестве Φ будем использовать вакуумное состояние. Тогда получим уравнение

$$\begin{aligned} \frac{dG_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{dt} = & -i\varepsilon_{\mathbf{k}}G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta(t-t') - \\ & - \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}}^* G_{\mathbf{k}-\mathbf{w},\mathbf{w},\mathbf{k}'} - \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}} G'_{\mathbf{w},\mathbf{k}+\mathbf{w},\mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (39.35)$$

где введены следующие краткие обозначения:

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -i \langle \Phi | T a_{\mathbf{k}}(t) a_{\mathbf{k}'}^+(t') \Phi \rangle, \quad (39.36)$$

$$G_{\mathbf{k}-\mathbf{w},\mathbf{w},\mathbf{k}'} = \langle \Phi | T a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) b_{\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^+(t') \Phi \rangle, \quad (39.37)$$

$$G'_{\mathbf{w},\mathbf{k}+\mathbf{w},\mathbf{k}'} = \langle \Phi | T b_{\mathbf{w}}^+(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^+(t') \Phi \rangle. \quad (39.38)$$

Появление функции (39.36) и есть тот результат, который мы хотели получить. Менее отраднo, что мы оказались вынужденными вновь ввести функции Грина нового типа, а именно (39.37) и (39.38). Теперь можно было бы попытаться представить функции (39.37) и (39.38) в виде произведения более простых функций Грина. Например, так:

$$G_{\mathbf{k}-\mathbf{w},\mathbf{w},\mathbf{k}'} = \langle \Phi | T a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^+(t') \Phi \rangle \langle \Phi | b_{\mathbf{w}}(t) \Phi \rangle. \quad (39.39)$$

Однако легко показать (см. упражнение 2), что (39.39) для вакуумного состояния Φ_0 исчезает. Тогда получился бы результат, согласно которому частицы в конечном счете движутся как свободные, поскольку дополнительные члены в (39.35), которые описывают связь между частицами и полем колебаний решетки, обращаются в нуль. Этот пример, таким образом, отчетливо демонстрирует, что при применении функций Грина можно легко сделать ошибку и использование этих функций требует тонкого

физического чутья. И действительно, в литературе имеются примеры, где делаются совершенно неверные приближения и прежде всего при заменах функций Грина их произведениями. Однако мы вовсе не хотим слишком пугать читателя, напротив, мы хотим показать, что с некоторой долей осторожности можно тем не менее быстро прийти к хорошему результату. Для этого введем еще уравнения для функций Грина (39.37) и (39.38). Дифференцируя (39.37) по времени, получаем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} G_{\mathbf{k}-\mathbf{w}, \mathbf{w}, \mathbf{k}'} &= \left\langle \Phi \left| \frac{dT}{dt} a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) b_{\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') \Phi \right. \right\rangle + \\ &+ \left\langle \Phi \left| \dot{T} a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) b_{\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') \Phi \right. \right\rangle + \left\langle \Phi \left| T a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) \dot{b}_{\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') \Phi \right. \right\rangle. \end{aligned} \quad (39.40)$$

Здесь выражение dT/dt имеет, вообще говоря, символическое значение. Оно должно лишь напоминать, что при дифференцировании следует обращать внимание на порядок следования времен t и t' . В остальном оно приводит к появлению одного дополнительного члена. Этот член выведен в упражнении 3. Он имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dt} a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) b_{\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') &= \delta(t-t') [a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) b_{\mathbf{w}}(t), a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t)]_+ = \\ &= \delta(t-t') b_{\mathbf{w}}(t) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{w}}. \end{aligned} \quad (39.41)$$

Наряду с первым членом в (39.40), который мы только что привели в явном виде (см. (39.41)), в (39.40) имеются еще два других члена. Для того чтобы вычислить эти члены, подставим вместо \dot{a} и \dot{b} правые части (39.32) и (39.33). Тогда получим следующее выражение:

$$\frac{d}{dt} G_{\mathbf{k}-\mathbf{w}, \mathbf{w}, \mathbf{k}'} = \text{I} + \text{II} + \text{III}, \quad (39.42)$$

где отдельные члены даются следующими выражениями:

$$\text{I} = \delta(t-t') \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{w}} \langle \Phi | b_{\mathbf{w}}(t) \Phi \rangle, \quad (39.43.I)$$

$$\begin{aligned} \text{II} = \left\langle \Phi \left| T \left\{ -i \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} - i \sum_{\mathbf{w}'} g_{\mathbf{w}'}^* a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}-\mathbf{w}'} b_{\mathbf{w}'} - \right. \right. \right. \\ \left. \left. - i \sum_{\mathbf{w}'} g_{\mathbf{w}'} b_{\mathbf{w}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}+\mathbf{w}'} \right\} b_{\mathbf{w}}(t) a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') \Phi \right. \right\rangle, \end{aligned} \quad (39.43.II)$$

$$\text{III} = \left\langle \Phi \left| T a_{\mathbf{k}-\mathbf{w}}(t) \left\{ -i \omega_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}} - i \sum_{\mathbf{k}''} g_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{k}''}^{\dagger} a_{\mathbf{k}''+\mathbf{w}} \right\}_t a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}(t') \Phi \right. \right\rangle. \quad (39.43.III)$$

Как будет показано в упражнении 2, член (39.43. I) исчезает. Член (39.43.II) содержит в фигурных скобках выражения разных

типов. Первое из них можно представить в виде

$$-i\epsilon_{k-w}G_{k-w,w,k'}. \quad (39.44)$$

Второе выражение в фигурных скобках содержит фоновый оператор уничтожения $b_{w'}$, который после перемножения членов оказывается рядом со вторым фоновым оператором уничтожения. Это означает, следовательно, что фононы уничтожаются дважды. Процесу уничтожения каждый раз ставится в соответствие константа связи g_w . Если ограничиться наинизшим приближением $\sim g_w^2$, то это выражение, следовательно, можно опустить. Выражение, которое связано с последним слагаемым в фигурных скобках, также исчезает, поскольку оператор b_w^\dagger , действуя справа на Φ_0 , дает нуль (см. упражнение 2). Таким образом, все выражение (39.43.И) принимает вид (39.44). Рассмотрим, наконец, выражение (39.43.ИИ). Здесь также стоят фигурные скобки. Первое выражение в них с точностью до множителя $-i\omega_w$ вновь приводит к функции Грина (39.37). Теперь рассмотрим второе выражение в (39.43.ИИ), которое состоит из суммы операторных выражений вида

$$a_{k-w}(t) a_{k''}^\dagger(t) a_{k''+w}^\dagger(t) a_{k'}^\dagger(t'). \quad (39.45)$$

Используя обычные перестановочные соотношения для ферми-частиц, можно обратить порядок следования двух первых операторов, что дает

$$\delta_{k'',k-w} a_{k''+w}(t) a_{k'}^\dagger(t') - a_{k''}^\dagger(t) a_{k-w}(t) a_{k''+w}(t) a_{k'}^\dagger(t'). \quad (39.46)$$

Теперь представим себе, что (39.45) и (39.46) действуют на вакуумное состояние. Рассмотрим действие второго стоящего в (39.46) выражения на Φ_0 . Сначала здесь рождается электрон. Затем, однако, должны быть уничтожены два электрона, но поскольку в наличии имеется только один, то действие соответствующего оператора на Φ_0 дает нуль. Тем самым, следовательно, выражение (39.45) оказывается тождественно равным первому слагаемому выражения (39.46) и содержит поэтому только два электронных оператора, которые стоят в первоначальном определении $G_{kk'}$. После этих несколько затянувшихся рассуждений мы обнаруживаем, что (39.43.ИИ) переходит в выражение

$$(39.43.ИИ) = -i\omega_w G_{k-w,w,k'} + g_w G_{kk'}. \quad (39.47)$$

Теперь подытожим наши результаты. Мы ввели уравнение для функции $G_{k-w,w,k'}$, которая была задана с помощью (39.42). Вычисление отдельных выражений I, II, III приводит затем к следующему конечному результату:

$$\frac{d}{dt} G_{k-w,w,k'} = -i(\epsilon_{k-w} + \omega_w) G_{k-w,w,k'} + g_w G_{kk'}. \quad (39.48)$$

Теперь могло бы показаться, что нам снова предстоит такая же скучная задача вывода аналогичного уравнения для (39.38). Однако, как можно показать по аналогии с упражнением 2, (39.38) обращается в нуль (по меньшей мере для состояния, в котором нет фононов):

$$G'_{\mathbf{w}, \mathbf{k}+\mathbf{w}, \mathbf{k}'} \equiv 0. \quad (39.49)$$

Тем самым наша задача — найти замкнутую систему уравнений для функций Грина — решена. Используя результаты (39.48) и (39.49), оба типа уравнений можно представить следующим образом:

$$\frac{dG_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} }{dt} = -i\varepsilon_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - i\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta(t-t') - \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}}^* G_{\mathbf{k}-\mathbf{w}, \mathbf{w}, \mathbf{k}'}, \quad (39.50)$$

$$\frac{d}{dt} G_{\mathbf{k}-\mathbf{w}, \mathbf{w}, \mathbf{k}'} = -i(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}}) G_{\mathbf{k}-\mathbf{w}, \mathbf{w}, \mathbf{k}'} + g_{\mathbf{w}} G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \quad (39.51)$$

При решении уравнений (39.50) и (39.51) кажется разумным по аналогии с решением уравнения для частицы без взаимодействия (39.13) вновь воспользоваться фурье-преобразованием. Поближе мы займемся этим в задании 5, а сначала с помощью другого метода решения покажем, что взаимодействующий с колебаниями решетки электрон может быть действительно описан с помощью новой смещенной энергии и константы затухания. При этом ограничимся случаем $t > t'$ и $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. Тогда в уравнении (39.50) неоднородный член $\sim \delta(t-t') = 0$ и система (39.50) и (39.51) переходит в систему линейных однородных уравнений с постоянными коэффициентами. Для решения подобных систем уравнений, как известно, полагают, что неизвестные функции пропорциональны экспоненциальным функциям:

$$G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}} e^{(-i\varepsilon - \gamma)t}, \quad (39.52)$$

$$G_{\mathbf{k}-\mathbf{w}, \mathbf{w}, \mathbf{k}} = D_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} e^{(-i\varepsilon - \gamma)t}, \quad (39.53)$$

где ε , γ , $C_{\mathbf{k}}$, $D_{\mathbf{k}, \mathbf{w}}$ — постоянные, подлежащие определению. Подстановка (39.52) и (39.53) в (39.50) и (39.51) непосредственно дает

$$(-i\varepsilon - \gamma) C_{\mathbf{k}} = -i\varepsilon_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}}^* D_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} \quad (39.54)$$

и

$$(-i\varepsilon - \gamma) D_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} = -i(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}}) D_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} + g_{\mathbf{w}} C_{\mathbf{k}}. \quad (39.55)$$

Из уравнения (39.55) можно найти $D_{\mathbf{k}, \mathbf{w}}$:

$$D_{\mathbf{k}, \mathbf{w}} = \frac{g_{\mathbf{w}} C_{\mathbf{k}}}{-i\varepsilon - \gamma + i\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} + i\omega_{\mathbf{w}}}. \quad (39.56)$$

Если теперь подставить это выражение в (39.54), то C_k в обеих частях сокращается и почти сразу получается уравнение

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon - i\gamma = \varepsilon_k - \sum_w |g_w|^2 \frac{1}{-\varepsilon + i\gamma + \varepsilon_{k-w} + \omega_w}. \end{array} \right. \quad (39.57)$$

Уравнение (39.57) представляет собой уравнение на собственные значения для $(\varepsilon - i\gamma)$. Поскольку $(\varepsilon - i\gamma)$ стоит под знаком суммы, то определение $(\varepsilon - i\gamma)$ может оказаться сложной задачей. Если мы ограничимся малыми константами связи $|g_w|^2$, то имеет смысл решать уравнение (39.57) методом итераций. В нулевом приближении сумму в (39.57) мы опустим, после чего получим

$$\varepsilon^{(0)} = \varepsilon_k, \quad \gamma^{(0)} = 0. \quad (39.58)$$

В следующей итерации подставим под знак суммы $\varepsilon = \varepsilon_k$. Ввиду того, что в (39.58) $\gamma^{(0)} = 0$, у нас могло бы возникнуть искушение и в следующей итерации положить $\gamma = \gamma^{(0)} = 0$, что приводит, однако, как показывает дальнейший анализ, к противоречию. Поэтому сначала сохраним γ , а затем рассмотрим с учетом (39.58) предельный переход $\gamma^{(0)} \rightarrow 0$:

$$\varepsilon - i\gamma = \varepsilon_k - \lim_{\gamma^{(0)} \rightarrow 0} \sum_w |g_w|^2 \frac{1}{-\varepsilon_k + \varepsilon_{k-w} + \omega_w + i\gamma^{(0)}}. \quad (39.59)$$

Для дальнейшего вычисления суммы в (39.59) преобразуем ее в интеграл. Как нам уже известно (см. (29.27)), константы связи g_w зависят от объема кристалла V следующим образом: $g_w \sim \sim 1/\sqrt{V}$. Поэтому положим

$$g_w = \frac{1}{\sqrt{V}} g_w^0. \quad (39.60)$$

Так как суммирование ведется по волновым векторам, то справедливо следующее соотношение (см. (30.27)):

$$\frac{1}{V} \sum_w = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int \dots d^3w.$$

Полученный таким образом интеграл

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int |g_w^0|^2 \frac{d^3w}{-\varepsilon_k + \varepsilon_{k-w} + \omega_w + i\gamma^{(0)}} \quad (39.61)$$

вычислим при $\gamma^{(0)} \rightarrow 0$, используя соотношение

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{\xi - \xi_0 + i\gamma} = P \frac{1}{(\xi - \xi_0)} - i\pi\delta(\xi - \xi_0), \quad (39.62)$$

где P означает главное значение. Если подставить (39.61) с уче-

том (39.62) в (39.59) и отделить действительную и мнимую части, то получим следующий конечный результат:

$$\varepsilon = \varepsilon_{\mathbf{k}} - P \frac{1}{(2\pi)^3} \int |g_{\mathbf{w}}^0|^2 \frac{1}{-\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}}} d^3w, \quad (39.63)$$

$$\gamma = -\pi \frac{1}{(2\pi)^3} \int |g_{\mathbf{w}}^0|^2 \delta(-\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}}) d^3w. \quad (39.64)$$

Результаты (39.63) и (39.64) уже встречались нам ранее в рамках теории возмущений. А именно, в рамках первого порядка теории возмущений мы нашли, что электрон при взаимодействии с колебаниями решетки (более точно в данном случае — благодаря испусканию фононов) рассеивается из начального состояния \mathbf{k} с вероятностью перехода в единицу времени, которая как раз дается выражением (39.64). Следует учесть, что здесь рассматривается особый случай, когда нет термически возбужденных фононов. Выражение (39.63) также встречалось нам уже в § 35, где вычислялась собственная энергия поляронов. Настоящий пример отчетливо демонстрирует большие преимущества применения функций Грина. Мы можем фактически, как мы уже видели в предыдущем параграфе, одним махом найти как собственные значения, так и время жизни возбужденного состояния. Читателю, желающему глубже проникнуть в рассмотрение этой проблемы, рекомендуются нижеследующие задания.

Задания к § 39

1. Вычислить (38.10) для свободных частиц, т. е. при $\psi \equiv \psi_0$, $\psi^+ \equiv \psi_0^+$, используя, однако, в качестве Φ n -частичное состояние. Остается ли при этом верным равенство $G(\mathbf{x}_2, t_2, \mathbf{x}_1, t_1) = 0$ при $t_2 < t_1$?

2. Показать, что $b_{\mathbf{w}}(t)\Phi_0 = 0$ (Φ_0 — вакуумное состояние для электронов и фононов).

Указание. Положить $b_{\mathbf{w}}(t) = e^{(i/\hbar)Ht} b_{\mathbf{w}} e^{-(i/\hbar)Ht}$ и разложить экспоненциальные функции справа в степенной ряд.

Подсказка: $H^n \Phi_0 = 0$. Почему?

Показать также, что $\langle \Phi_0 | b_{\mathbf{w}}^+(t) \Phi_0 \rangle = 0$.

3. Доказать (39.41).

Указание. Провести соответствующие преобразования, как в (39.4) и последующих уравнениях.

4. Найти графически корни уравнения (39.59), определив точки пересечения прямых $f(\varepsilon) = \varepsilon$

$$f(\varepsilon) = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{w}} |g_{\mathbf{w}}|^2 \frac{1}{-\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}}}.$$

Для примера достаточно взять в сумме лишь несколько членов.

5. Решить уравнения (39.50), (39.51) с помощью преобразования Фурье:

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}}(t-t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} C_{\mathbf{k}}(\Omega) e^{-i\Omega(t-t')} d\Omega, \quad (\text{A } 39.1)$$

$$G_{\mathbf{k}-\mathbf{w},\mathbf{w},\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} D_{\mathbf{k},\mathbf{w}}(\Omega) e^{-i\Omega(t-t')} d\Omega. \quad (\text{A } 39.2)$$

Указание. После подстановки (A 39.1) и (A 39.2) вместе с представлением Фурье δ -функции $\delta(t-t')$ в (39.50) и (39.51) получаются уравнения

$$iC_{\mathbf{k}}(\Omega)(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \Omega) + \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}}^* D_{\mathbf{k},\mathbf{w}}(\Omega) = -\frac{i}{\sqrt{2\pi}},$$

$$iD_{\mathbf{k},\mathbf{w}}(\Omega)(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}} - \Omega) - g_{\mathbf{w}} C_{\mathbf{k}}(\Omega) = 0,$$

имеющие решение

$$C_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{f(\Omega)},$$

$$f(\Omega) = \Omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{w}} |g_{\mathbf{w}}|^2 \frac{1}{-\Omega + \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} + \omega_{\mathbf{w}}}.$$

Чтобы вычислить (A 39.1) и (A 39.2), следует воспользоваться теоремой о вычетах и убедиться в том, что уравнение, определяющее полюс Ω_p : $f(\Omega_p) = 0$, совпадает с уравнением (39.57).

§ 40. Основные экспериментальные факты, касающиеся сверхпроводимости

Прежде чем изложить микроскопическую теорию сверхпроводимости, зададимся вопросом, чего вообще следует ожидать от теории такого рода. Для этого напомним кратко основные экспериментальные факты.

1. При определенной критической температуре T_c некоторые вещества переходят из нормального в сверхпроводящее состояние.

2. В сверхпроводящем состоянии электрическая проводимость становится бесконечной.

3. *Эффект Мейсснера — Оксенфельда*: независимо от предыстории, магнитная индукция в сверхпроводнике равна нулю (например, сначала можно включить магнитное поле, которое про-

Магнитная индукция *Магнитная индукция*

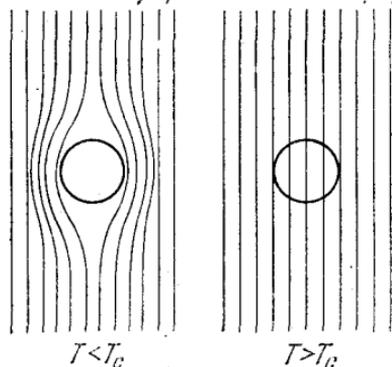


Рис. 58. Эффект Мейсснера — Оксенфельда. Поведение поля в цилиндрическом сверхпроводнике при $T < T_c$ и $T > T_c$.

никает в металл с обычной проводимостью, а затем, при охлаждении металла ниже температуры перехода, вытесняется из него, или сначала можно охладить, а затем наложить магнитное поле, которое уже не может проникнуть в металл (рис. 58)). Отсюда следует, что сверхпроводящее состояние в заданном внешнем поле является единственным стабильным состоянием, к которому применимы законы термодинамики. Согласно эффекту Мейсснера — Оксенфельда, сверхпроводник ведет себя как совершенный диамагнетик с равной нулю восприимчивостью¹⁾.

Как для макроскопической, так и для микроскопической теории важно, что совершенный диамагнетизм и бесконечная проводимость являются независимыми свойствами сверхпроводника.

¹⁾ Если говорить точно, то диамагнетизм не вполне совершенный, так как магнитное поле проникает на глубину $10^{-6} - 10^{-5}$ см.

4. Переход «нормальный проводник — сверхпроводник» (не говоря об одномерных сверхпроводниках) является фазовым переходом второго рода: удельная теплоемкость при $T = T_c$ испытывает скачок.

5. Удельная теплоемкость электронов при низких температурах меняется как $\exp(-\Delta E/k_B T)$.

Теперь кратко обсудим уравнения, с помощью которых можно описать бесконечную проводимость и совершенный диамагнетизм сверхпроводника. Не вдаваясь в подробности, рассмотрим уравнения Максвелла без внешних зарядов. Плотность тока разложим на части, одна из которых \mathbf{j}_n , вызывается нормальными электронами, а другая \mathbf{j}_s , происходит от сверхпроводящих электронов. Таким образом, мы полагаем

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_n + \mathbf{j}_s. \quad (40.1)$$

Далее пренебрежем временными изменениями электрического тока смещения

$$\dot{\mathbf{D}} = 0 \quad (40.2)$$

и положим

$$\mu = 1. \quad (40.3)$$

Пренебрегая \mathbf{j}_n по сравнению с \mathbf{j}_s , запишем (при принятых выше условиях) уравнения Максвелла в виде

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = 0, \quad (40.4)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (40.5)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{B}}, \quad (40.6)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_s. \quad (40.7)$$

Эти уравнения Максвелла братья Лондоны дополнили следующими материальными уравнениями:

1. Уравнение для ускорения:

$$\Lambda \frac{\partial \mathbf{j}_s}{\partial t} = \mathbf{E}. \quad (40.8)$$

Это уравнение для ускорения описывает нарастание тока во времени при наложении поля, т. е. описывает бесконечную проводимость. Если бы все электроны были подобны свободным частицам, для которых сопротивление отсутствует, то Λ давалось бы выражением

$$\Lambda = \frac{m}{ne^2}, \quad (40.9)$$

где m — масса электрона, а n — плотность электронов.

2. Второе уравнение Лондонов гласит:

$$\Lambda \operatorname{rot} \mathbf{j}_s = -\mathbf{B}/c. \quad (40.10)$$

Как можно показать, постоянная Λ в (40.10) должна совпадать, чтобы не было противоречия, с постоянной в (40.8). Убедимся кратко в том, что уравнение (40.10) действительно представляет диамагнитные свойства сверхпроводника.

Для этого рассмотрим сверхпроводник, имеющий неограниченную протяженность. Координату, направленную вглубь сверхпроводника, обозначим через z . Из уравнения (40.7) заключаем, как обычно в электродинамике, что \mathbf{V}_t постоянна.

Исходя из специально выбранной конфигурации сверхпроводника, можно принять, что \mathbf{V} имеет только x -компоненту, которая может зависеть еще и от z . Тем самым условие (40.5) оказывается выполненным. Исключая из уравнений (40.7) и (40.10) плотность тока \mathbf{j} , получаем

$$\nabla^2 \mathbf{V} = -\text{rot rot } \mathbf{V} = \frac{4\pi}{\Lambda c^2} \mathbf{V}, \quad (40.11)$$

или, если выписать только отличные от нуля компоненты,

$$\frac{\partial^2 B_x}{\partial z^2} = \frac{4\pi}{\Lambda c^2} B_x. \quad (40.12)$$

Решение (40.12) имеет вид

$$B_x(z) = B(0) e^{-z/\lambda}. \quad (40.13)$$

Это решение показывает, что поле внутри сверхпроводника действительно затухает экспоненциально, причем глубина проникновения λ , как следует из (40.12), дается следующим выражением:

$$\lambda = \left(\frac{\Lambda c^2}{4\pi} \right)^{1/2}. \quad (40.14)$$

Подставляя численное значение для Λ , находим величину λ :

$$\lambda = 10^{-6} \text{ см.} \quad (40.15)$$

Таким образом, наше рассмотрение показало, что уравнение (40.10) действительно описывает диамагнетизм сверхпроводника.

Следует заметить, что λ зависит от температуры T . При $T = T_c$ получаем $\lambda = \infty$, а при $T = 0$ получаем $\lambda = \lambda_{\min}$. Поскольку глубина проникновения λ через Λ зависит от концентрации сверхпроводящих электронов (см. (40.9)), то это является прямым указанием на то, что число сверхпроводящих электронов само является функцией температуры.

Покажем теперь одно следствие из уравнений Лондонов, которое может быть прямо использовано в микроскопической теории сверхпроводимости. Для этого рассмотрим поперечное поле, введем, как обычно, векторный потенциал с помощью уравнений

$$\mathbf{V} = \text{rot } \mathbf{A}, \quad (40.16)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (40.17)$$

и дополнительное условие поперечности векторного потенциала

$$\text{div } \mathbf{A} = 0. \quad (40.18)$$

Подставляя эти выражения в материальные уравнения (40.8) и (40.10), получим

$$\Lambda \operatorname{rot} \mathbf{j}_s = -\frac{1}{c} \operatorname{rot} \mathbf{A} \quad (40.19)$$

и

$$\Lambda \frac{\partial \mathbf{j}_s}{\partial t} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (40.20)$$

Эти уравнения можно сразу проинтегрировать. Если принять, что нормальная составляющая \mathbf{A} на границе замкнутого сверхпроводника исчезает, то интегрирование дает следующий результат:

$$\left| \Lambda \mathbf{j}_s = -\frac{1}{c} \mathbf{A}. \quad (40.21) \right.$$

Обоснование этой связи между сверхпроводящим током \mathbf{j}_s и векторным потенциалом \mathbf{A} может, если не вдаваться в тонкости, рассматриваться в качестве прямой цепи микроскопической теории. Для того чтобы установить смысл этого соотношения, рассмотрим выражение для плотности тока, которое, как известно из квантовой механики, имеет следующий вид:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}) = \frac{e\hbar}{2mi} \{ \psi^*(\mathbf{x}) \operatorname{grad} \psi(\mathbf{x}) - \psi(\mathbf{x}) \operatorname{grad} \psi^*(\mathbf{x}) \} - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}). \quad (40.22)$$

В квантовополевой формулировке ψ и ψ^* , естественно, следует заменить операторами поля. Среднее значение плотности тока в формализме квантовой теории поля дается тогда выражением

$$\overline{\mathbf{j}(\mathbf{x})} = \langle \Phi | \mathbf{j}(\mathbf{x}) | \Phi \rangle. \quad (40.23)$$

Если нет магнитного поля и тем самым нет векторного потенциала \mathbf{A} , то в основном состоянии, естественно, плотность тока исчезает, т. е. стоящее в фигурных скобках выражение дает тогда нуль. Если бы и при включенном магнитном поле это выражение, как и прежде, было равно нулю, то плотность тока имела бы требуемый выражением (40.21) вид. То есть тогда плотность тока \mathbf{j} была бы пропорциональна векторному потенциалу, умноженному на плотность $\psi^+\psi$ электронов. Поэтому вначале могло бы показаться, что каждый проводник мог бы стать сверхпроводником. Однако это ни в коем случае не так. Как показывает более обстоятельное решение, при введении векторного потенциала электронные волновые функции также испытывают его влияние. При этом вклад от членов в фигурных скобках полностью компенсируется последним выражением в (40.22), которое пропорционально \mathbf{A} .

Как следовало бы сформулировать микроскопическую теорию, которая гарантировала бы, что стоящее в фигурных скобках вы-

ражение, кратко обозначенное через j_1 , и в присутствии магнитного поля остается равным нулю, так что лишь второе выражение в (40.22), кратко обозначенное через j_2 ,

$$j_2 = -\frac{e^2}{mc} A \langle \Phi | \psi^+ (x) \psi (x) | \Phi \rangle = -\frac{e^2}{mc} A n, \quad (40.24)$$

дает ненулевой вклад? Это было бы возможно в том случае, если бы волновые функции обладали своего рода жесткостью, оставаясь неизменными и при наложении магнитного поля. Как раз такая ситуация имеет место в диамагнитном атоме. Жесткость волновых функций была бы гарантирована, если бы возбужденное состояние сверхпроводника было отделено от основного состояния энергетической щелью. Эта идея, высказанная Лондоном, оказалась чрезвычайно плодотворной, и основная цель развития микроскопической теории сверхпроводимости состояла в том, чтобы показать существование такой энергетической щели. Такая энергетическая щель, если бы она к тому же зависела от температуры, хорошо объясняла бы экспериментальное поведение удельной теплоемкости. Прежде чем мы поближе подойдем к вопросу об энергетической щели, сделаем еще два замечания.

1. При слабых и медленно меняющихся полях предполагается, что основное состояние «адиабатически» меняется с полем. Однако никаких заметных возбуждений над основным состоянием нет.

2. Далее добавим, что наряду с глубиной проникновения λ в теорию сверхпроводимости следует ввести (хотя бы феноменологически) еще вторую длину, а именно длину когерентности ξ . Как нам теперь известно, и мы увидим это в следующих параграфах, эта длина когерентности определяется пространственной протяженностью парных волновых функций сверхпроводника. Если

$$\xi \gg \lambda, \quad (40.25)$$

то говорят о мягком сверхпроводнике, а если

$$\lambda \gg \xi, \quad (40.26)$$

то говорят о жестком сверхпроводнике. Здесь мы закончим наше феноменологическое рассмотрение сверхпроводимости и перейдем к вопросу о том, чего же следует требовать от микроскопической теории. При этом важнейшая задача состоит в том, чтобы вскрыть, какие взаимодействия между электронами являются решающими для обоснования жесткости основного состояния и лежащей за ним энергетической щели. Несмотря на большое число попыток, прошло много времени, прежде чем Фрелих нашел правильный результат. Исходя из соображений, являющихся типичными для представлений квантовой теории, Фрелих установил, что между электронами через посредство колебаний решетки может

возникнуть прямое взаимодействие. Это взаимодействие тем сильнее, чем сильнее взаимодействие электронов с колебаниями решетки. С другой стороны, сила этого последнего взаимодействия определяет величину электрического сопротивления. Чем более выражено это взаимодействие, тем выше электрическое сопротивление при прочих равных условиях. На основании этих рассуждений следует ожидать «парадоксальный» результат, что вещества являются тем лучшими сверхпроводниками, чем выше их сопротивление в нормальном состоянии. Это одновременно гениальное и смелое предположение нашло в проведенных сразу же экспериментах по изотопическому эффекту блестящее подтверждение. Амплитуда колебаний решетки и тем самым эффективное электрон-решеточное взаимодействие зависят от массы иона M , и чем меньше масса, тем больше взаимодействие. Теория Фрелиха предсказала, что температура перехода T_c должна быть пропорциональна $M^{-1/2}$, как это действительно было обнаружено. Однако абсолютная величина T_c оказалась слишком большой. Это было связано с тем, что Фрелих вычислял собственную энергию электронов. Теперь мы знаем, что T_c в значительной степени определяется взаимодействием между электронами. Далее мы двинемся вперед следующим образом. Из электрон-решеточного взаимодействия мы выведем эффективное фрелиховское взаимодействие между электронами и обсудим методы решения полученного таким образом уравнения Шредингера.

§ 41. Теория сверхпроводимости: введение фрелиховского взаимодействия между электронами

Исходным пунктом исследований в этом разделе является оператор Гамильтона из § 29, который описывает взаимодействие между электронами и колебаниями решетки. Как мы увидим позже, для теории сверхпроводимости существенно наличие у электрона спина. Поэтому к волновому числу \mathbf{k} добавим еще один индекс σ , который указывает, находится ли электрон в одном спиновом состоянии (спин вверх) или в другом спиновом состоянии (спин вниз). Таким образом, это спиновое квантовое число σ может иметь два значения: «спин вверх» (стрелка вверх) и «спин вниз» (стрелка вниз). Тогда отдельные слагаемые оператора Гамильтона

$$H = H_0 + H_{вз} \quad (41.1)$$

можно представить следующим образом:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hbar \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar \omega_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^{\dagger} b_{\mathbf{w}} \quad (41.2)$$

$$H_{вз} = \hbar \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}, \sigma} (g_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma} + g_{\mathbf{w}}^* b_{\mathbf{w}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}). \quad (41.3)$$

При этом принимается, как обычно, что взаимодействие между электронами и колебаниями решетки не оказывает влияния на спин. Поэтому как у операторов рождения, так и у операторов уничтожения электронов в (41.3) стоит один и тот же индекс σ .

Вначале мы будем исследовать эту задачу в представлении Гейзенберга, которое рассматривалось в § 16, и обратим особое внимание на уравнения (16.34), (16.35). Как мы увидим, представление Гейзенберга особенно наглядно и позволяет, по крайней мере интуитивно, лучше понять сделанные здесь приближения. Как можно увидеть, вернувшись назад к уравнениям (16.34) и (16.35), в правых частях этих уравнений стоят также частоты ω_w . Чтобы избавиться от них, предпримем преобразование фононных и электронных операторов рождения и уничтожения, предлагаемое представлением взаимодействия

$$b_w^+ = \tilde{b}_w^+ e^{i\omega_w t}, \quad (41.4)$$

$$b_w = \tilde{b}_w e^{-i\omega_w t}, \quad (41.5)$$

$$a_{k,\sigma}^+ = \tilde{a}_{k,\sigma}^+ e^{i\varepsilon_k t}, \quad (41.6)$$

$$a_{k,\sigma} = \tilde{a}_{k,\sigma} e^{-i\varepsilon_k t}. \quad (41.7)$$

Тогда уравнение для фононного оператора рождения принимает вид

$$\dot{\tilde{b}}_w^+ = i \sum_{k,\sigma} g_w e^{i(\varepsilon_{k+w} - \varepsilon_k - \omega_w)t} \tilde{a}_{k+w,\sigma}^+ \tilde{a}_{k,\sigma}. \quad (41.8)$$

Если бы электронные операторы в (41.8) были классическими величинами, то (41.8) означало бы, что фононная амплитуда \tilde{b}_w^+ изменяется во времени благодаря движению электронов. Это лишь отражает то простое обстоятельство, что пролетающий сквозь решетку электрон поляризует ее, смещая ионы решетки из их положений равновесия. Со своей стороны, смещения ионов оказывают обратное действие на электрон. Чтобы лучше понять это обратное воздействие, рассмотрим временное изменение вначале произвольного оператора \tilde{A} , построенного из электронных операторов. Временные изменения мы получим, как обычно, применяя уравнение

$$\dot{\tilde{A}} = \frac{i}{\hbar} [H, \tilde{A}]. \quad (41.9)$$

Теперь примем во внимание, что мы пользуемся электронными операторами в представлении взаимодействия, т. е. если применить преобразования (41.6—41.7), то для оператора \tilde{A} получим

следующее уравнение:

$$\dot{\tilde{A}} = i \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{w}, \sigma} \{ g_{\mathbf{w}} [\tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma}, \tilde{A}] \tilde{b}_{\mathbf{w}} e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})t} + \\ + g_{\mathbf{w}}^* \tilde{b}_{\mathbf{w}}^+ [\tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}, \tilde{A}] e^{-i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}})t} \}. \quad (41.10)$$

Поскольку $\tilde{b}_{\mathbf{w}}$ и $\tilde{b}_{\mathbf{w}}^+$ коммутируют с электронными операторами (в тот же момент времени), то порядок следования множителей $\tilde{b}_{\mathbf{w}}$ и $\tilde{b}_{\mathbf{w}}^+$ в (41.10) безразличен. Имея в виду последующие приближения, при которых эта перестановочность не гарантирована, мы поставили все же в (41.10) оператор $\tilde{b}_{\mathbf{w}}^+$ впереди, чтобы сохранить эрмитову форму выражения.

В то время как уравнение (41.8) описывает смещение ионов под влиянием движения электронов, уравнение (41.10), повторим это еще раз, описывает действие ионов на электрон. Имеет смысл попытаться исключить из этих двух уравнений координаты колебаний решетки, чтобы получить действие электрона на другие электроны и на самого себя. Для проведения этой программы проинтегрируем уравнение (41.8) по времени, в результате чего сразу получим

$$\tilde{b}_{\mathbf{w}}^+(t) = i \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} g_{\mathbf{w}} \int_{-\infty}^t e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{w}})\tau} \times \\ \times (\tilde{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}, \sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}', \sigma'})_{\tau} d\tau + \tilde{b}_{\mathbf{w}}^+(-\infty). \quad (41.11)$$

Это пока еще совершенно точное выражение. Индекс у выражения в скобках под интегралом указывает на то, что стоящие здесь операторы берутся в момент времени τ . Последний член в (41.11) относится только лишь к колебаниям решетки.

Для последующего будет полезно постоянно считать, что операторы представлены классическими числовыми функциями. На первый взгляд это может показаться несколько странным, однако с помощью методов, о которых мы не будем здесь говорить, во многих случаях операторным уравнениям можно поставить в соответствие классические уравнения. Во всяком случае, мы хотим отметить, что это действительно возможно — обращаться с операторами при исследовании их временного поведения как с классическими величинами.

Теперь сделаем предположение, что взаимодействие между электронами и колебаниями решетки не слишком сильное. Тогда можно принять, что основная временная зависимость операторов a^+ и a представляется стоящими в (41.6) и (41.7) экспоненциальными функциями, а операторы \tilde{a} и \tilde{a}^+ меняются медленно. Это означает, что операторное выражение в скобках под интегралом в (41.11) берется в момент времени t и выносится из-под знака интеграла. Тогда интеграл сразу вычисляется и мы, если, как

обычно, пренебречь нижней границей интегрирования (что можно сделать с помощью «адиабатического множителя»), получаем

$$\tilde{b}_w^+(t) \approx \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} g_w (\tilde{a}_{\mathbf{k}'+w, \sigma'}^+ a_{\mathbf{k}', \sigma'}) t \frac{e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}'+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_w)t}}{(\varepsilon_{\mathbf{k}'+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_w)} + \tilde{b}_w^+(-\infty). \quad (41.12)$$

Нам удалось выразить в явном виде амплитуды колебаний решетки через электронные величины. Соответствующее выражение, конечно, получается и для оператора $\tilde{b}_w(t)$. Если подставить (41.12) и только что упомянутое выражение для $\tilde{b}_w(t)$ в (41.10), то получим

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{A}} = & i \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', w \\ \sigma, \sigma'}} |g_w|^2 \frac{e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+w} + \varepsilon_{\mathbf{k}'})t}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_w} \times \\ & \times [\tilde{a}_{\mathbf{k}+w, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{A}] \tilde{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+w, \sigma'} + \\ & + i \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', w \\ \sigma, \sigma'}} |g_w|^2 \frac{e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+w} + \varepsilon_{\mathbf{k}'})t}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_w} (\tilde{a}_{\mathbf{k}+w, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma}) \times \\ & \times [\tilde{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+w, \sigma'} \tilde{A}]. \quad (41.13) \end{aligned}$$

В правой части этого уравнения благодаря присутствию экспоненциальных функций содержатся осциллирующие со временем члены. Если провести усреднение по небольшому временному интервалу, то заметный вклад будут давать только такие члены, в которых экспоненциальные функции близки к единице, т. е. члены следующего вида:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon_{\mathbf{k}'+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}. \quad (41.13a)$$

На этом же основании можно положить, что оба знаменателя в (41.13) равны друг другу, вследствие чего общее выражение можно вынести за скобки перед операторами. Небольшие промежуточные вычисления показывают, что для суммы оставшихся операторов имеет место соотношение

$$\begin{aligned} [\tilde{a}_{\mathbf{k}+w, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{A}] \tilde{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+w, \sigma'} + \tilde{a}_{\mathbf{k}+w, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma} [\tilde{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+w, \sigma'} \tilde{A}] = \\ = [\tilde{a}_{\mathbf{k}+w, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+w, \sigma'} \tilde{A}]. \quad (41.14) \end{aligned}$$

Используя (41.14), можно упростить выражение (41.13):

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{A}} = & i \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', w \\ \sigma, \sigma'}} |g_w|^2 \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}'+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_w} e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+w} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+w} + \varepsilon_{\mathbf{k}'})t} \times \\ & \times [\tilde{a}_{\mathbf{k}+w, \sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+w, \sigma'} \tilde{A}]. \quad (41.15) \end{aligned}$$

При этом в вычислениях были опущены стоящие в начале выра-

жения (41.13) члены, которые содержат фоновые операторы рождения и уничтожения в момент времени $t = -\infty$. Можно действительно показать, что эти члены ведут к процессам рассеяния и не дают вклада в прямое взаимодействие между электронами. Теперь наша цель заключается в том, чтобы привести выражение (41.15) к такому виду, в каком оно было первоначально найдено Фрелихом для электрон-электронного взаимодействия. Для этого сначала поменяем в коммутаторе (41.15) порядок следования электронных операторов так, чтобы слева стояли операторы рождения, а справа — операторы уничтожения. Это приводит, при использовании обычных перестановочных соотношений, к выражению

$$\begin{aligned} \tilde{A} = & i \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w} \\ \sigma, \sigma'}} |g_{\mathbf{w}}|^2 \frac{-1}{\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}}} e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'})t} \times \\ & \times [\tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^+ a_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k}'+\mathbf{w},\sigma'}, \tilde{A}] + \\ & + i \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \mathbf{w}} |g_{\mathbf{w}}|^2 \frac{-1}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{w}}} [\tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}, \tilde{A}] \end{aligned} \quad (41.16)$$

(поскольку электронные операторы теперь обозначаются не только индексом \mathbf{k} , но и, сверх того, индексом σ , перестановочные соотношения, которые у нас были ранее, следует обобщить так, чтобы справа вместо $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ теперь стояло произведение символов Кронекера $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$.

Видно, что вторая сумма в (41.16) содержит только два электронных оператора, а не четыре. Несколько ниже мы увидим совершенно отчетливо, что эта вторая сумма описывает сдвиг энергии отдельного электрона. Теперь преобразуем первую сумму, для чего рассмотрим выражение

$$\frac{\tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k},\sigma} \tilde{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{w},\sigma'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{w}}} \quad (41.17)$$

В первой сумме в (41.16) и в числителе (41.17) поменяем местами \mathbf{k}, σ с \mathbf{k}', σ' (но только в числителе, а не в знаменателе, поскольку соотношение (41.13а) считается справедливым). Тогда вместо (41.17) получим выражение

$$\frac{\tilde{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{w},\sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}',\sigma'} \tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \omega_{\mathbf{w}}} \quad (41.18)$$

Теперь предпримем следующие замены:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{k} &\rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{w} \\ \mathbf{k}' &\rightarrow \mathbf{k}' - \mathbf{w} \\ \mathbf{w} &\rightarrow -\mathbf{w} \end{aligned} \right\} \frac{\tilde{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{w},\sigma'} \tilde{a}_{\mathbf{k},\sigma}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \omega_{-\mathbf{w}}} \quad (41.19)$$

с помощью которых выражение (41.18) переходит в выражение (41.19). Поскольку эти замены относятся ко всей сумме в (41.16), то значение этой суммы, естественно, остается неизменным. Далее примем, что для колебаний решетки, как обычно, выполняется соотношение

$$\omega_{-w} = \omega_w, \quad (41.20)$$

согласно которому частота зависит только от абсолютной величины фоновонного волнового вектора. Равным образом примем, что то же самое справедливо и для констант взаимодействия

$$|g_{-w}|^2 = |g_w|^2. \quad (41.21)$$

Тем самым выражение (41.19) после изменения порядка следования электронных операторов переходит в выражение

$$\frac{\tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k},\sigma} \tilde{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{w},\sigma'}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \omega_w}. \quad (41.22)$$

Выражение (41.22), если выполнить в нем согласно (41.16) суммирование, совпадает с соответствующей суммой членов (41.17). Теперь приведем выражение для взаимодействия (41.17), как это тотчас будет видно, к симметричному виду. Для этого возьмем полусумму выражений (41.17), (41.22) и подставим ее затем в (41.16). Это приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{A}} = & i \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w} \\ \sigma, \sigma'}} |g_w|^2 \frac{\omega_w}{(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2 - \omega_w^2} e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'})t} \times \\ & \times [\tilde{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{w},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}'+\mathbf{w},\sigma'} \tilde{a}_{\mathbf{k},\sigma} \tilde{A}] + \\ & + i \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \mathbf{w}} |g_w|^2 \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} - \omega_w} [\tilde{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k},\sigma} \tilde{A}]. \quad (41.23) \end{aligned}$$

В последней сумме (41.23) $\mathbf{k} + \mathbf{w}$ заменено на \mathbf{k} . Уравнение (41.23) имеет фундаментальное значение. А именно, оно показывает, что временная производная электронного оператора \tilde{A} порождается перестановкой того же самого оператора с другим оператором. В последующем изложении можно было бы исходить из уравнения (41.23) и построить средние значения. Этот путь приводит, как мы уже видели в §§ 38, 39, непосредственно к методу функций Грина. Однако мы воспользуемся несколько более общепринятым методом, а именно, будем держать курс на эффективное уравнение Шредингера. Для этого в качестве первого шага откажемся от представления взаимодействия, т. е. согласно формулам (41.6) и (41.7) перейдем от операторов \tilde{a} к операторам a .

Тогда (41.23) можно представить в следующем общем виде:

$$\dot{A} = \frac{i}{\hbar} [H_0, A] + \frac{i}{\hbar} [H_{вз}^{\Phi\Phi}, A]. \quad (41.24)$$

Сравнение (41.24) с (41.23) показывает, что эффективное взаимодействие дается оператором

$$H_{вз}^{\Phi\Phi} = \hbar \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w} \\ \sigma, \sigma'}} |g_w|^2 \frac{\omega_w}{(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2 - \omega_w^2} \times \\ \times a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma} + \\ + \hbar \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma} \left\{ \sum_{\mathbf{w}} |g_w|^2 \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{w}} - \omega_w} \right\}. \quad (41.25)$$

Вторая сумма в (41.25) имеет точно тот же вид, что и собственная энергия электронов в решетке. Следовательно, она ведет к смещению энергии, которое можно сразу учесть с помощью метода эффективной массы в $\varepsilon_{\text{полн}, \mathbf{k}}$. В последующем, таким образом, будем считать, что этот эффект уже учтен в энергии электрона. Первая сумма в (41.25) содержит основной результат. В этой сумме присутствуют четыре электронных оператора, которые описывают уничтожение двух электронов и последующее рождение двух других электронов. Если кратко обозначить стоящий в этом выражении числовой множитель через $-(1/2)v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w}}$, то электрон-электронное взаимодействие принимает окончательно следующий вид:

$$H_{эл-эл} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w} \\ \sigma, \sigma'}} v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (41.26)$$

где $v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w}}$ имеет следующий явный вид:

$$v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w}} = \frac{2|g_w|^2 \hbar \omega_w}{\omega_w^2 - (\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})^2}. \quad (41.27)$$

Тем самым мы выполнили нашу задачу. Нам удалось ввести мгновенное взаимодействие между электронами, исходя из их индивидуального взаимодействия с колебаниями решетки.

§ 42. Основное состояние сверхпроводника по теории Бардина — Купера — Шриффера (БКШ)

Взаимодействие электронов с колебаниями решетки приводит, как было показано в §§ 36 и 41, к *прямому* взаимодействию между электронами. Соответствующий оператор взаимодействия был введен в явном виде в § 41. Если добавить теперь к нему опера-

тор энергии свободных электронов, то получится *полный оператор Гамильтона*

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w} \\ \sigma, \sigma'}} v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (42.1)$$

То, что взаимодействие между двумя электронами через посредство решетки, вообще говоря, имеет характер притяжения, было показано еще в § 36. Однако непосредственно из оператора Гамильтона (42.1) этого не видно. Как показал Купер, выражение (42.1) приводит к притяжению между двумя электронами с *антипараллельными* спинами в рамках следующей модели: все электроны металла «искусственно» удерживают внутри сферы Ферми и решают соответствующее (42.1) уравнение Шредингера для двух лишних электронов, находящихся вне сферы Ферми. В реальном случае, естественно, следует учесть то, что все электроны из-за взаимодействия примут новую конфигурацию. Самое очевидное предположение состоит в том, что электроны будут образовывать пары. Согласно этому предположению кажется разумным следующий метод конструирования волновых функций основного сверхпроводящего состояния: исходя из вакуумного состояния, следует построить такие электронные состояния, в которых спарены электроны с антипараллельными спинами и противоположными импульсами. Если есть N электронов, то образуются $N/2$ пар, так что соответствующая волновая функция дается выражением

$$\left(\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right)^{N/2} \Phi_0. \quad (42.2)$$

Стоящие в нем коэффициенты разложения $c_{\mathbf{k}}$ должны быть еще определены, причем так, чтобы соответствующее (42.1) уравнение Шредингера удовлетворялось «оптимально». Волновая функция (42.2) соответствует фиксированному числу электронов, что поначалу кажется совершенно само собой разумеющимся. Однако для практических вычислений существенно более удобным оказалось выражение с переменным числом электронов. Формально такую волновую функцию можно получить, просуммировав выражения типа (42.2) по переменным показателям степени m (вместо фиксированного $N/2$):

$$\Phi = \sum_m \alpha_m \left(\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right)^m \Phi_0. \quad (42.3)$$

Коэффициенты α_m пока что произвольны. Потребуем, чтобы эти коэффициенты удовлетворяли следующим условиям:

1. Они должны быть определены так, чтобы снова наибольший вклад в выражение (42.3) давали в конце концов только те члены, у которых m весьма близко к среднему числу электронов $m = N/2$.

2. Кроме того, сумма по m в (42.3) по возможности должна быть представима в явном виде.

Оба требования можно выполнить с помощью подстановки $\alpha_m = 1/m!$. Тогда (42.3) переходит в

$$\Phi = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \right)^m \Phi_0. \quad (42.4)$$

Получившаяся теперь сумма есть не что иное, как разложение в ряд экспоненты, к чему мы уже привыкли. Члены разложения являются операторами. Тогда (42.4) можно привести к виду

$$\Phi = \mathcal{N} \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \right\} \Phi_0, \quad (42.5)$$

где введен соответствующий нормировочный множитель \mathcal{N} .

В теории сверхпроводимости обычно применяется не выражение вида (42.5), а приведенные ниже эквивалентные ему выражения. Поскольку операторы $(a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+)$ для различных \mathbf{k} коммутируют между собой, то экспоненциальную функцию в (42.5) можно представить в виде произведения экспонент:

$$\Phi = \mathcal{N} \prod_{\mathbf{k}} e^{c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+} \Phi_0. \quad (42.6)$$

Множественное действие операторов рождения на одно и то же состояние в ферми-статистике дает нуль. Поэтому разложение экспоненциальной функции обрывается на втором члене, так что (42.6) переходит в выражение

$$\Phi = \mathcal{N} \prod_{\mathbf{k}} (1 + c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) \Phi_0. \quad (42.7)$$

Чтобы не выходить за рамки общепринятых обозначений, разложим нормировочный множитель в произведение парциальных нормировочных множителей и внесем каждый из них под знак произведения по \mathbf{k} . Тогда окончательно получим

$$\Phi = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) \Phi_0 \equiv \prod_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}, \quad (42.8)$$

$$\text{где } c_{\mathbf{k}} = \frac{v_{\mathbf{k}}}{n_{\mathbf{k}}}. \quad (42.9)$$

Разложение Φ в произведение по $\Phi_{\mathbf{k}}$ станет более ясным, если разложить в произведение по $\Phi_{0,\mathbf{k}}$ вакуумное состояние Φ_0 :

$$\Phi_0 = \prod_{\mathbf{k}} \Phi_{0,\mathbf{k}},$$

где $a_{\mathbf{k}\uparrow}\Phi_{0,\mathbf{k}} = a_{-\mathbf{k}\downarrow}\Phi_{0,\mathbf{k}} = 0$, и положить $\Phi_{\mathbf{k}} = (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) \Phi_{0,\mathbf{k}}$.
Условие нормировки имеет вид (см. задание 2)

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1, \quad (42.10)$$

где ради простоты в последующем будет принято, что $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ являются действительными константами. Как мы увидим, это требование может быть выполнено всегда. Вероятность того, что состояние с электроном со спином вверх и волновым вектором \mathbf{k} занято, дается выражением

$$\langle \Phi | a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}\uparrow} \Phi \rangle = v_{\mathbf{k}}^2 \quad (42.11)$$

(см. задание 1). Вероятность того, что электронные состояния \mathbf{k} и \mathbf{k}' со спином вверх заняты одновременно, представляется выражением

$$\langle \Phi | a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}'\uparrow} \Phi \rangle = v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2. \quad (42.12)$$

Теперь нам следует кратко заняться вопросом, как можно было бы обойти трудности, возникающие из-за того, что волновой функции Φ не соответствует фиксированное число электронов. Для этого введем оператор числа частиц

$$N_{\text{оп}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (42.13)$$

и потребуем, чтобы среднее значение (42.13) относительно волновой функции Φ совпадало с наперед заданным средним числом электронов. Это дополнительное условие с помощью множителя Лагранжа μ можно ввести в уравнение Шредингера, заменив оператор Гамильтона H на оператор

$$H' = H - \mu N_{\text{оп}}. \quad (42.14)$$

После того как установлена общая форма решения и известен оператор Гамильтона, дальнейшая процедура в принципе ясна: сначала следует образовать среднее значение оператора (42.14), а затем таким образом определить коэффициенты $c_{\mathbf{k}}$ и $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ в (42.5) и (42.8), чтобы это среднее значение было минимально. При этом следует принять во внимание дополнительное условие, что $\langle \Phi | N_{\text{оп}} | \Phi \rangle = N$, где N — наперед заданное число электронов.

Обсудим подробно вычисление подобных средних значений. Для средних значений от $\sum_{\mathbf{k}, \sigma} (E_{\mathbf{k}} - \mu) a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma}$ с учетом (42.11)

находим

$$E_{\text{кин}} = 2 \sum_{\mathbf{k}} E'_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2, \quad (42.15)$$

где положено $E'_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \mu$.

Среднее значение энергии взаимодействия дается выражением

$$E_{\text{пот}} = -\frac{1}{2} \left\langle \Phi \left| \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w} \\ \sigma, \sigma'}} v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{w}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ a_{\mathbf{k}'+\mathbf{w}, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma} \Phi \right. \right\rangle. \quad (42.16)$$

При вычислении (42.16) следует исследовать различные случаи.

1. $\mathbf{w} = 0$. Соответствующий член суммы (42.16) теперь равен

$$v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', 0} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ a_{\mathbf{k}', \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma} \Phi \rangle. \quad (42.17)$$

Члены такого рода уже встречались нам ранее в рамках метода Хартри — Фока в § 20 и представляют собственную энергию.

2. Следующим рассмотрим член вида

$$v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{w}} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma'}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma'} \Phi \rangle, \quad (42.18)$$

который можно привести к виду

$$-\delta_{\sigma\sigma'} v_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{w}} v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}+\mathbf{w}}^2. \quad (42.19)$$

Ниже увидим более подробно, как вычисляются выражения подобного типа, поэтому мы сразу привели конечный результат (42.19). Этот член можно назвать собственной обменной энергией. Действительно, видно, что электрон со спином σ переходит из состояния \mathbf{k} в состояние $\mathbf{k} + \mathbf{w}$, в то время как другой электрон со спином σ' рассеивается из состояния $\mathbf{k} + \mathbf{w}$ в состояние \mathbf{k} . Очевидно, в этом случае речь идет об электронном обмене. И этот член также можно считать учтенным в рамках метода самосогласованного поля.

3. Главный интерес для нас представляет член вида

$$v_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k}} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \Phi \rangle. \quad (42.20)$$

Мы подробно покажем, как вычисляется это среднее значение. Для этого разложим Φ в произведение по $\Phi_{\mathbf{k}''}$ согласно (42.8) и соберем вместе те члены \mathbf{k}'' , которые не затрагиваются операторами a^+ , a с индексами \mathbf{k} , \mathbf{k}' . Вынося соответствующее среднее значение из (42.20) и разлагая его в произведение средних значений, получаем

$$\prod_{\mathbf{k}'' \neq \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \Phi_{\mathbf{k}''} | \Phi_{\mathbf{k}''} \rangle = 1 \quad (42.21)$$

(см. задание 2). Тем самым от выражения (42.20) остается исследовать лишь следующее среднее:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \Phi \rangle = & \\ = \langle \Phi_{0\mathbf{k}} \Phi_{0\mathbf{k}'} | (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}) (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}) \times & \\ \times a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+ | a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) \times & \\ \times (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+) \Phi_{0\mathbf{k}} \Phi_{0\mathbf{k}'} \rangle. & \quad (42.22) \end{aligned}$$

Вертикальные штриховые линии не имеют никакого математического смысла; они стоят лишь для памяти, как разделительные линии при последующих вычислениях.

Вначале подробно вычислим выражение (при $\Phi_0 = \Phi_{0\mathbf{k}}\Phi_{0\mathbf{k}'}$)

$$a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+)(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'}a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+)\Phi_0. \quad (42.23)$$

Тогда очевидным образом получаем соотношения

$$a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\Phi_0 = 0, \quad (42.24)$$

$$a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+\Phi_0 = 0, \quad \mathbf{k} \neq \mathbf{k}', \quad (42.25)$$

$$a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}v_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+v_{\mathbf{k}'}a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+\Phi_0 = v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+\Phi_0, \quad (42.26)$$

$$a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}a_{\mathbf{k}\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+\Phi_0 = u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}}\Phi_0. \quad (42.27)$$

Следует порекомендовать читателю самому еще раз проследить отдельные этапы вычисления этих результатов, используя перестановочные соотношения и свойства вакуумного состояния Φ_0 .

С учетом результатов (42.24—42.27) выражение (42.23) переходит в выражение

$$u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}}\Phi_0 + v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+\Phi_0. \quad (42.28)$$

Расчет, который сейчас был проведен слева направо по отношению к штриховой линии в (42.22), теперь можно соответствующим образом провести справа налево (см. (13.35), (13.36)), поменяв местами \mathbf{k} и \mathbf{k}' . Тогда сразу найдем, что выражение

$$\langle \Phi_0 | (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'}a_{-\mathbf{k}'\downarrow}a_{\mathbf{k}'\uparrow}) (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}) a_{\mathbf{k}\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+ \quad (42.29)$$

можно представить в виде

$$\langle \Phi_0 | (u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}). \quad (42.30)$$

Если теперь подставить оба выражения (42.28) и (42.30) в выражение (42.22), то мы, наконец, получим

$$(42.20) = \langle \Phi_0 | (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow}) v_{\mathbf{k},-\mathbf{k}',\mathbf{k}'-\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}} \times \\ \times (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'}a_{\mathbf{k}'\uparrow}^+a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+) \Phi_0 \rangle = v_{\mathbf{k},-\mathbf{k}',\mathbf{k}'-\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}. \quad (42.31)$$

Эти члены не появляются в приближении Хартри — Фока и являются совершенно новыми. Они имеют, естественно, решающее значение для всей теории сверхпроводимости.

Теперь вернемся к нашей первоначальной цели. Она состоит в том, чтобы явно вычислить среднее значение полной энергии. С помощью только что полученных результатов (42.15), (42.31) находим

$$E_{\text{полн}} = 2 \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}' v_{\mathbf{k}}^2 - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}, \quad (42.32)$$

где использовано сокращение

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \frac{1}{2} (v_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{k}' - \mathbf{k}} + v_{-\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k} - \mathbf{k}'}). \quad (42.33)$$

Теперь найдем минимум среднего значения. Для этого продифференцируем выражение (42.32) по $v_{\mathbf{k}}$. При этом следует проследить, чтобы выполнялось дополнительное условие $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$, в результате которого, естественно, $u_{\mathbf{k}}$ становится функцией $v_{\mathbf{k}}$. При этом дополнительном условии дифференцирование (42.32) по $v_{\mathbf{k}}$ выполняется немедленно и приводит к результату

$$2 \left(2E'_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^2 / u_{\mathbf{k}}) \right) = 0. \quad (42.34)$$

С установлением уравнения (42.32) или (42.34) программа квантовополевого рассмотрения оказывается завершенной. Интересно лишь посмотреть, какие собственные значения энергии основного состояния дает это решение и как выглядит распределение электронов по состояниям \mathbf{k} . Поэтому обратимся к решению системы уравнений (42.34). Для этого введем сокращенное обозначение

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}, \quad (42.35)$$

с помощью которого (42.34) переходит в

$$(v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2) \Delta_{\mathbf{k}} + 2E'_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = 0. \quad (42.36)$$

Уравнение (42.36) можно формально решить относительно u/v , что дает

$$\frac{u_{\mathbf{k}}}{v_{\mathbf{k}}} = \frac{E'_{\mathbf{k}} \pm (E'_{\mathbf{k}}{}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}}{\Delta_{\mathbf{k}}}. \quad (42.37)$$

Далее получаем соотношение

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \pm \Delta_{\mathbf{k}} / 2\tilde{E}_{\mathbf{k}}, \quad (42.38)$$

где введено сокращенное обозначение

$$\tilde{E}_{\mathbf{k}} = (E'_{\mathbf{k}}{}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}. \quad (42.39)$$

Можно показать (чего мы не будем здесь делать), что из выражения для энергии следует условие $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} > 0$, которое и решает выбор до сих пор не определенного знака в выражении (42.38). Отсюда получаем формулы

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2\tilde{E}_{\mathbf{k}}}, \quad \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E'_{\mathbf{k}} + \tilde{E}_{\mathbf{k}}} \quad (42.40)$$

и

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E'_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \right), \quad u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{E'_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \right). \quad (42.41)$$

Теперь следует учесть, что $\Delta_{\mathbf{k}}$ также зависит от u , v . Поэтому, если подставить результат (42.40) в (42.35), то u , v можно исключить и тогда получается уравнение для величин $\Delta_{\mathbf{k}}$:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}'}}. \quad (42.42)$$

Это уравнение — относительно сложное, поскольку $\Delta_{\mathbf{k}}$ входит также и в $\tilde{E}_{\mathbf{k}}$. Естественно, можно попытаться решить уравнение (42.42) с помощью вычислительной машины. Однако определенное представление о смысле этого уравнения можно получить, приняв следующую модель для $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$:

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} V_0 & \text{для } |E'_{\mathbf{k}}|, |E'_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (42.43)$$

Эта подстановка следует из определения $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ (см. (42.33)) и $v_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega}$ (см. (41.27); обратить внимание на знак знаменателя в этом выражении). Положим, далее, в основу этой модели своего рода среднюю частоту колебаний решетки ω . Тогда в рамках этой модели сразу получаем

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= 0 & \text{при } |E'_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega, \\ \Delta_{\mathbf{k}} &= \Delta & \text{при } |E'_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega. \end{aligned}$$

При помощи подстановки (42.43) уравнение (42.42) принимает вид

$$1 = V_0 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2(E_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}}. \quad (42.44)$$

Суммирование по \mathbf{k} при этом, в силу условия (42.43), оказывается ограниченным. Как можно показать, в уравнении $E'_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \mu$ энергия μ — это энергия на поверхности Ферми, так что суммирование в (42.44) следует распространить только на область вблизи поверхности Ферми — $\hbar\omega \leq E' \leq \hbar\omega$. Как обычно, сумму заменим интегралом. Поскольку \mathbf{k} и $E_{\mathbf{k}}$ связаны между собой, то интеграл по d^3k можно выразить через интеграл по dE' :

$$d^3k = \tilde{D}(E') dE',$$

где $\tilde{D}(E')$ — плотность состояний.

Далее положим

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \tilde{D}(E') = D(E'),$$

причем V — объем кристалла. Тогда (42.44) переходит в

$$\int_{-\hbar\omega}^{\hbar\omega} \frac{D(E') dE'}{(E'^2 + \Delta^2)^{1/2}} = \frac{2}{V_0}. \quad (42.45)$$

Так как $\hbar\omega$ значительно меньше энергии Ферми, то следует сделать замену $D(E') \approx D(0)$ и вынести это число за знак интеграла. После этого интеграл, естественно, сразу вычисляется. Тогда вместо (42.45) получаем соотношение

$$\Delta = \frac{\hbar\omega}{\text{sh} [1/D(0) V_0]}. \quad (42.46)$$

Поскольку в практических случаях $D(0)V_0 \ll 1$, то окончательно вместо (42.46) получается следующее приближенное выражение:

$$\Delta = 2\hbar\omega e^{-1/D(0)V_0}. \quad (42.47)$$

Подведем итог проведенным выше рассуждениям: наша цель состояла в вычислении коэффициентов $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$. Поскольку в подстановки для этих коэффициентов входит только параметр Δ , то задача свелась к определению этого параметра, что и было сделано в (42.46) и (42.47).

Теперь вычислим энергию основного состояния сверхпроводника, подставив в (42.32) $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$. Из этой энергии вычтем энергию электронов без учета взаимодействия, т. е. энергию ферми-моря, тогда для добавки энергии за счет взаимодействия получаем следующее выражение:

$$\Delta E_{\text{полн}} = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} E'_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{E'_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \right)}_{E_{\text{полн}}} - \frac{1}{4} V_0 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\Delta^2}{\tilde{E}_{\mathbf{k}} \tilde{E}_{\mathbf{k}'}} - \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} E'_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{E'_{\mathbf{k}}}{|E'_{\mathbf{k}}|} \right)}_{E_{\text{ферми-море}}}. \quad (42.48)$$

Чтобы понять выбранное выражение для $E_{\text{ферми-море}}$, вспомним, что $E'_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \mu$ представляет собой разность энергий относительно уровня Ферми: $E'_{\mathbf{k}} > 0$ для электронов вне сферы Ферми и $E'_{\mathbf{k}} < 0$ для электронов внутри сферы Ферми. Очевидно, что

$$E'_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{E'_{\mathbf{k}}}{|E'_{\mathbf{k}}|} \right) = 0 \quad \text{при } E'_{\mathbf{k}} > 0, \\ E'_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{E'_{\mathbf{k}}}{|E'_{\mathbf{k}}|} \right) = 2E'_{\mathbf{k}} \quad \text{при } E'_{\mathbf{k}} < 0. \quad (42.49)$$

Отсюда получаем

$$E_{\text{ферми-море}} \equiv 2 \sum_{\mathbf{k}, E_{\mathbf{k}} < \mu} E_{\mathbf{k}}, \quad (42.50)$$

где множитель 2 учитывает оба направления спина.

Сложим в (42.48) первый и последний члены, упростим вторую пропорциональную V_0 сумму с помощью соотношения (42.44) и преобразуем сумму в интеграл

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{полн}} &= D(0) \int_{-\hbar\omega}^{\hbar\omega} \left\{ |E'| - \frac{E'^2}{\sqrt{E'^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{2} \frac{\Delta^2}{\sqrt{E'^2 + \Delta^2}} \right\} dE' = \\ &= -D(0) (\hbar\omega)^2 \left[\sqrt{1 + (\Delta/\hbar\omega)^2} - 1 \right], \quad (42.51) \end{aligned}$$

который при $\Delta \ll \hbar\omega$ упрощается и приводится к виду

$$\Delta E_{\text{полн}} = -D(0) \frac{1}{2} \Delta^2. \quad (42.52)$$

Таким образом, общая энергия с учетом электрон-электронного взаимодействия действительно ниже энергии состояния без взаимодействия.

Задания к § 42

1. Доказать (42.11).

Указание. Разложить Φ согласно (42.8) и разложить $\langle \Phi | a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}'\uparrow} \Phi \rangle$ в произведении средних значений по отдельным значениям \mathbf{k} .

2. Показать, что

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathbf{k}} | \Phi_{\mathbf{k}'} \rangle &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad \text{при } \Phi_{\mathbf{k}} = (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) \Phi_0 \quad \text{и} \\ u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 &= 1. \end{aligned}$$

§ 43. Возбужденные состояния сверхпроводника

В этом параграфе мы сделаем нечто весьма замечательное. А именно, мы покажем, как, зная волновые функции основного состояния, можно сконструировать явные выражения для операторов, которые создают из основного состояния возбужденные состояния. В качестве ведущей идеи мы будем руководствоваться идеей, развитой в § 6, где рассматривался пример смещенного гармонического осциллятора. Ход мыслей при этом будет следующий: как мы видели в предыдущем параграфе, основное состояние сверхпроводника можно представить в виде

$$\Phi_{\text{осн}} = \prod_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} e^{c_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+} \Phi_0. \quad (43.1)$$

При этом действие экспоненциальной функции на вакуумное состояние приводит к созданию определенного нового состояния. Теперь проведем аналогию между функцией (43.1) и функцией смещенного гармонического осциллятора

$$N e^{\beta b^+} \Phi_0. \quad (43.2)$$

В § 6 о гармоническом осцилляторе мы обнаружили следующее: стоящие перед вакуумным состоянием Φ_0 экспоненциальные функции можно представить в виде некоторого унитарного преобразования, в результате чего функция типа (43.2) приобрела вид

$$e^{\beta(b^+ - b)} \Phi_0. \quad (43.3)$$

Затем было показано, что с помощью такого рода унитарного преобразования можно получить новые операторы рождения и уничтожения. Здесь мы воспользуемся тем же ходом рассуждений.

Действительно, в § 14 мы видели, что для каждой отдельной экспоненциальной функции ферми-операторов a_1^+ , a_2^+ :

$$N e^{c a_1^+ a_2^+} \quad (43.4)$$

можно найти унитарное преобразование

$$e^{c(a_1^+ a_2^+ - a_2 a_1)} \quad (43.5)$$

такое, что

$$N e^{c a_1^+ a_2^+} \Phi_0 = e^{c a_1^+ a_2^+ - c a_2 a_1} \Phi_0. \quad (43.6)$$

Предприняв теперь следующие обобщения:

$$\begin{aligned} a_1^+ &\rightarrow a_{\mathbf{k}\uparrow}^+, & a_1 &\rightarrow a_{\mathbf{k}\uparrow}, \\ a_2^+ &\rightarrow a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+, & a_2 &\rightarrow a_{-\mathbf{k}\downarrow}, \end{aligned} \quad (43.7)$$

заменяем волновую функцию (43.1) следующей волновой функцией:

$$\left| \Phi_{\text{осн}} = \prod_{\mathbf{k}} e^{c_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ - a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow})} \Phi_0. \quad (43.8) \right.$$

Эту точную замену можно интерпретировать следующим образом. Основное состояние теории БКШ может быть создано из вакуума с помощью унитарного преобразования U , т. е.

$$\left| \Phi_{\text{осн}} = U \Phi_0 \quad (43.9) \right.$$

при

$$U = \prod_{\mathbf{k}} e^{c_{\mathbf{k}}'(a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ - a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow})} \equiv \prod_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}. \quad (43.10)$$

Теперь мы хотим, как и в случае смещенного гармонического осциллятора (см. §§ 6 и 14), перейти с помощью этого унитарного преобразования к новому набору операторов и состояний, так чтобы БКШ-основное состояние стало «вакуумным состоянием» для наших новых операторов. Для этого построим операторы

$$\tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ = U_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ U_{\mathbf{k}}^+, \quad \tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow} = U_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow} U_{\mathbf{k}}^+. \quad (43.11)$$

Как было показано в § 14, преобразование (43.11) можно привести в явном виде, что приводит к результату

$$\tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ = a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ u_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}\downarrow} v_{\mathbf{k}}. \quad (43.12)$$

Новый оператор $\tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^+$ тем самым оказывается представленным в виде линейной комбинации операторов рождения и уничтожения. Соответствующим образом можно подействовать преобразованием U и на другие операторы $a_{\mathbf{k}\uparrow}$ и т. д. Эти преобразования приводят к следующим результатам:

$$\tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow} = a_{\mathbf{k}\uparrow} u_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ v_{\mathbf{k}}, \quad (43.13)$$

$$\tilde{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ = a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ u_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}\uparrow} v_{\mathbf{k}}, \quad (43.14)$$

$$\tilde{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} = a_{-\mathbf{k}\downarrow} u_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ v_{\mathbf{k}}. \quad (43.15)$$

Выражения (43.12—43.15) представляют собой известные преобразования Боголюбова — Валатина. Здесь отчетливо видна основная идея этих преобразований. Новые операторы, как было уже показано ранее с помощью прямых расчетов, удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и старые операторы. Следовательно, они снова представляют ферми-частицы. Однако теперь они описывают не рождение одного электрона, а представляют процесс рождения возбужденного состояния или, другими словами, квазичастицы. Эти новые операторы отличаются тем, что они переводят основное состояние теории БКШ в новое «вакуумное состояние»:

$$\tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow} \Phi_{\text{осн}} = 0 \quad \text{и} \quad \tilde{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} \Phi_{\text{осн}} = 0.$$

Вакуумное состояние квазичастиц получается непосредственно из соотношений (43.11) и (43.9):

$$\tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow} \Phi_{\text{осн}} = U a_{\mathbf{k}\uparrow} \underbrace{UU}_{=1} \Phi_0 = U \underbrace{a_{\mathbf{k}\uparrow}}_{=0} \Phi_0 = 0$$

(почему $U_{\mathbf{k}}$ в (43.11) можно заменить на U ?). Теперь, однако,

следует указать на существенное отличие этих результатов от гармонического осциллятора. В случае гармонического осциллятора основное состояние имело точно вид (43.2), и поэтому состояния, полученные с помощью преобразованных операторов, также были точными. Здесь же основное состояние представлено выражением (43.1) лишь приближенно. На этом основании мы не можем быть наперед уверены, что с помощью нашего метода будут получены точные возбужденные состояния. В противном случае было бы возможно дать точное решение проблемы многих частиц. На самом же деле получается следующая ситуация. С помощью преобразований (43.12—43.15) одна часть оператора Гамильтона диагонализуется, т. е. становится точно решаемой с помощью операторов числа частиц. Но при этом остаются еще и другая часть оператора Гамильтона.

Критерий качества всей процедуры состоит в следующем: является ли эта недиагонализованная часть оператора Гамильтона лишь малым возмущением или нет. Дополнительный член такого рода ведет к тому, что квазичастицы взаимодействуют друг с другом, т. е. рассеиваются из начальных состояний и, следовательно, имеют конечное время жизни γ . Вся процедура имеет смысл лишь до тех пор, пока уширение энергетических уровней за счет конечного времени жизни много меньше полной энергии квазичастицы. То есть должно выполняться условие

$$\gamma_{\mathbf{k}} \ll \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}. \quad (43.16)$$

В последующем изложении мы будем считать, что это условие выполняется, и проведем упомянутую процедуру. Для этого разрешим (43.12—43.15) относительно операторов a , a^+ и выразим их в виде линейных комбинаций операторов \tilde{a} , \tilde{a}^+ . Затем подставим эти комбинации в $H' = H - \mu N_{\text{оп}}$ (42.14) и после элементарных преобразований получим

$$\left| H' = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{E}_{\mathbf{k}} (\tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \tilde{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + \tilde{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \tilde{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}) + \text{остаток}. \quad (43.17) \right.$$

Поскольку новые операторы \tilde{a} , \tilde{a}^+ снова удовлетворяют перестановочным ферми-соотношениям, то теперь уже нахождение возбужденных состояний и соответствующих им энергий является тривиальным (если только не принимать во внимание «остаток»).

Согласно § 42, энергия возбуждения $\tilde{E}_{\mathbf{k}}$ «квазичастицы» дается выражением

$$\left| \tilde{E}_{\mathbf{k}} = (E_{\mathbf{k}}'^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}. \quad (43.18) \right.$$

Последующее простое рассмотрение показывает, что тем самым мы показали существование энергетической щели: без

взаимодействия между электронами $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$. Энергия возбуждения $\tilde{E}_{\mathbf{k}} \equiv E'_{\mathbf{k}}$ начинается от значения $E_{\mathbf{k}} - \mu = 0$ и непрерывно нарастает.

При $\Delta \neq 0$, напротив, самое глубокое возбужденное состояние \mathbf{k}_0 отделено от основного состояния энергией $\tilde{E}_{\mathbf{k}_0} = \Delta$, т. е. энергетической щелью. Тем самым достигнута важнейшая цель микроскопической теории сверхпроводимости. К этому можно лишь добавить доказательство того, что в сверхпроводнике должен существовать эффект Мейсснера — Оксенфельда.

Мы не будем подробно проводить соответствующие расчеты, хотя основная идея проста: к (42.1) добавляют еще один добавочный член, который описывает взаимодействие электронов с магнитным полем (см. также (44.2)), и учитывают его в наименьшем приближении теории возмущений. Если затем вычислить среднее значение тока, то по существу получается соотношение (40.24).

В заключение сделаем еще одно замечание относительно условия возникновения сверхпроводимости. До сих пор в §§ 42, 43 мы исследовали лишь притягивающее взаимодействие между электронами, которое возникает благодаря их взаимодействию с колебаниями решетки, а кулоновское взаимодействие полностью опустили. Как можно показать, кулоновское (отталкивающее) взаимодействие между каждыми двумя электронами сильно экранируется другими электронами. Так что в результате имеется лишь остаточное отталкивающее взаимодействие.

Если теперь учесть оба (притягивающее и отталкивающее) взаимодействия, то в соответствии с конкретными параметрами данного твердого тела перевес имеет либо одно, либо другое взаимодействие. Хотя имеются весьма полезные эмпирические правила, которые позволяют установить характер взаимодействия, выполнить априорное вычисление вряд ли возможно.

Весьма интересный раздел представляет собой изучение фазового перехода в точке перехода в сверхпроводящее состояние. К сожалению, изложение этого явления, например, с помощью температурных функций Грина или теории Ландау — Гинзбурга выходит далеко за рамки нашей книги.

Глава VIII. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С КВАНТОВАННЫМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

§ 44. Взаимодействие между излучением и веществом: оператор Гамильтона

В этом параграфе будет введен оператор Гамильтона взаимодействия электронов с квантованным полем излучения, при этом будет использовано правило, с которым мы познакомились в § 15.

Построив оператор Гамильтона квантованного электронного поля, находящегося под воздействием поля излучения, и добавив к нему оператор Гамильтона свободного светового поля, мы получим полный оператор Гамильтона H .

а) Оператор Гамильтона электронного волнового поля. Поскольку поле излучения описывается с помощью векторного потенциала A , то сначала нам следует поближе познакомиться с классической функцией Гамильтона, а затем и с оператором Гамильтона электрона, движущегося в поле векторного потенциала A . Мы подойдем к этой задаче в рамках метода первичного и затем вторичного квантования, а начнем с функции Гамильтона классической физики. Как можно показать (см. задание 1), классическая функция Гамильтона для электрона, который движется в поле векторного потенциала $A(x)$ и скалярного потенциала $V(x)$, имеет следующий вид:

$$H_{\text{кл}} = \frac{1}{2m} \left(p - \frac{e}{c} A(x) \right)^2 + V(x). \quad (44.1)$$

В рамках первичного квантования переход к оператору Гамильтона H шредингеровской волновой механики совершается с помощью замены p на оператор $(\hbar/i)\nabla$.

С помощью этого оператора Гамильтона H во вторичном квантовании мы строим $\int \psi^+(x) H \psi(x) d^3x$ и подчиняем $\psi^+(x)$ и $\psi(x)$ перестановочным ферми-соотношениям (13.8). Добавив, наконец, соответствующий оператор взаимодействия $H_{\text{вз}}$, мы учтем и кулоновское взаимодействие между электронами. Выражение для $H_{\text{вз}}$ нам уже встречалось ранее, но мы приведем его сейчас еще раз в явном виде. Таким образом, искомый оператор Гамильтона в представлении вторичного квантования

имеет вид

$$\left| H_{\text{эл}} = \int \psi^+ (\mathbf{x}) \left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{x}) \right\} \psi (\mathbf{x}) d^3x + H_{\text{вз}}. \right. \quad (44.2)$$

Выражение в (44.2), которое содержит векторный потенциал, можно еще более упростить. А именно, если возвести выражение в круглых скобках в квадрат, то, учитывая точный порядок следования операторов, получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = & -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{\hbar e}{2mci} \nabla \mathbf{A} - \\ & - \frac{\hbar e}{2mci} \mathbf{A} \nabla + \frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2. \end{aligned} \quad (44.3)$$

Ввиду свойств оператора набла имеет место равенство

$$\nabla(\mathbf{A}\psi) = \psi \nabla \mathbf{A} + \mathbf{A} \nabla \psi, \quad (44.4)$$

где первый член в правой части, ввиду равенства нулю дивергенции векторного потенциала (см.(11.26))

$$\nabla \mathbf{A} = 0, \quad (44.5)$$

выпадает.

Тогда оператор $H_{\text{эл}}$ можно представить в виде

$$\left| H_{\text{эл}} = H_{0,\text{эл}} + H_{\text{эл-св}} + H_{\text{эл-св}}^{(\text{нл})} + H_{\text{вз}}, \right. \quad (44.6)$$

где

$$\left| H_{0,\text{эл}} = \int \psi^+ (\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \psi (\mathbf{x}) d^3x, \right. \quad (44.6a)$$

$$\left| H_{\text{эл-св}} = \int \psi^+ (\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar e}{mic} \mathbf{A} (\mathbf{x}) \nabla \right) \psi (\mathbf{x}) d^3x, \right. \quad (44.6b)$$

а также

$$\left| H_{\text{эл-св}}^{(\text{нл})} = \int \psi^+ (\mathbf{x}) \left(\frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right) \psi (\mathbf{x}) d^3x, \right. \quad (44.6в)$$

$$\left| H_{\text{вз}} = \frac{1}{2} \int \psi^+ (\mathbf{x}) \psi^+ (\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi (\mathbf{x}') \psi (\mathbf{x}) d^3x d^3x'. \right. \quad (44.6г)$$

Отдельные выражения (44.6a — 44.6г) имеют следующий смысл: $H_{0,\text{эл}}$ относится к движению электронов в потенциальном поле $V(\mathbf{x})$; $H_{\text{эл-св}}$ описывает взаимодействие между электронами и светом, причем векторный потенциал входит сюда *линейно*. $H_{\text{эл-св}}^{(\text{нл})}$ описывает другое взаимодействие между электронами и светом, причем сюда входит квадрат векторного потенциала \mathbf{A} , следовательно, это *нелинейный* член. В последующем изложении мы пренебрежем этим членом, что оправдано для малого \mathbf{A} . (Поскольку \mathbf{A} становится оператором, то это означает, что матричные

элементы \mathbf{A} для состояний поля, которые здесь будут рассматриваться, достаточно малы.) Последний член, $H_{вз}$, описывает кулоновское взаимодействие между электронами.

б) Оператор Гамильтона свободного поля излучения. В этом случае также целесообразно разложить векторный потенциал по плоским волнам (см. § 11):

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}, j} \sqrt{\frac{\hbar 2\pi c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}, j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} b_{\mathbf{k}, j} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} b_{\mathbf{k}, j}^{\dagger} \right). \quad (44.7)$$

Здесь $\omega_{\mathbf{k}}$ — частоты парциальных волн излучения, $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, j}$ — вектор поляризации волны \mathbf{k} . Поскольку имеются два произвольных направления поляризации, мы будем различать их индексом j . V — объем нормировки, $b_{\mathbf{k}, j}$ и $b_{\mathbf{k}, j}^{\dagger}$ — операторы рождения и уничтожения, удовлетворяющие обычным бозевским перестановочным соотношениям.

Согласно § 11, оператор Гамильтона в этом случае имеет вид

$$H_{св} = \sum_{\mathbf{k}, j} \hbar \omega_{\mathbf{k}, j} b_{\mathbf{k}, j}^{\dagger} b_{\mathbf{k}, j}. \quad (44.8)$$

Оператор Гамильтона полной системы равен сумме $H_{эл}$ и $H_{св}$:

$$H_{полн} = H_{эл} + H_{св}. \quad (44.9)$$

Для последующего представим сумму $H_{эл} + H_{св}$ в (44.9) несколько иным образом:

$$H_{полн} = H_0 + H_{эл-св} + H_{вз}. \quad (44.10)$$

Здесь оператор H_0 состоит из суммы операторов Гамильтона свободных полей:

$$H_0 = H_{0, эл} + H_{св}, \quad (44.10а)$$

причем $H_{0, эл}$, $H_{эл-св}$ и $H_{вз}$ уже встречались нам в (44.6), а $H_{св}$ определен в (44.8). По ряду соображений оператор Гамильтона полезно представить в другом виде. Как мы уже много раз видели ранее, полевые операторы $\psi(\mathbf{x})$ и $\psi^{\dagger}(\mathbf{x})$ имеет смысл разложить по собственным функциям уравнения Шредингера

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mu} a_{\mu} \varphi_{\mu}(\mathbf{x}), \quad (44.11а)$$

$$\psi^{\dagger}(\mathbf{x}) = \sum_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} \varphi_{\mu}^*(\mathbf{x}). \quad (44.11б)$$

В нашем случае в качестве функций $\varphi_{\mu}(\mathbf{x})$ целесообразно выбрать решения уравнения Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right\} \varphi_{\mu} = E_{\mu} \varphi_{\mu}. \quad (44.12)$$

Прежде чем мы подставим разложения (44.11а) и (44.11б) в (44.9) и (44.6), поговорим немного о перестановочных соотношениях. Перестановочные соотношения только для операторов поля излучения и только для операторов электронного волнового поля нам уже довольно хорошо знакомы (см. (11.55 — 11.57), (13.8)). Далее мы потребуем, чтобы перестановочные соотношения, связывающие полевые операторы одного поля с полевыми операторами другого поля, обращались в нуль, т. е. чтобы имели место равенства

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{x}'), \mathbf{A}(\mathbf{x})] &= 0, & [\psi(\mathbf{x}'), \mathbf{II}(\mathbf{x})] &= 0, \\ [\psi^+(\mathbf{x}'), \mathbf{A}(\mathbf{x})] &= 0, & [\psi^+(\mathbf{x}'), \mathbf{II}(\mathbf{x})] &= 0. \end{aligned} \quad (44.13)$$

Здесь $\mathbf{II}(\mathbf{x})$ — канонически сопряженный $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ импульс. Если с помощью разложений (44.7) и (44.11а, б) ввести операторы поля излучения $b_{\mathbf{k},j}^+$, $b_{\mathbf{k},j}$, а также электронные операторы рождения и уничтожения a_{μ}^+ , a_{μ} , то согласно (44.13) можно показать, что

$$\begin{cases} [a_{\mu}, b_{\mathbf{k},j}] = 0, & [a_{\mu}, b_{\mathbf{k},j}^+] = 0, \\ [a_{\mu}^+, b_{\mathbf{k},j}] = 0, & [a_{\mu}^+, b_{\mathbf{k},j}^+] = 0. \end{cases} \quad (44.14)$$

Подставим разложения (44.11а) и (44.11б), а также (44.7) в (44.10). При этом члены в (44.10) примут новый вид, и мы приведем их в явном виде. Оба стоящих в H_0 (см. (44.10а)) выражения уже встречались нам ранее (см. §§ 13, 11), так что их можно отсюда заимствовать:

$$\left| H_0 = \sum_{\mu} E_{\mu} a_{\mu}^+ a_{\mu} + \sum_{\mathbf{k},j} \hbar \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k},j}^+ b_{\mathbf{k},j}. \right. \quad (44.15)$$

Новым для нас является член $H_{\text{эл.-св}}$, поэтому мы выведем его в явном виде. Сначала рассмотрим разложение векторного потенциала (44.7): совершенно очевидно, что \mathbf{A} содержит две разнородные части: одна из них зависит только от b , а вторая содержит только b^+ . Соответственно этому запишем

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_b + \mathbf{A}_{b^+} \quad (44.16)$$

и подставим это разложение в (44.6б):

$$H_{\text{эл.-св}} \sim \int \psi^+(\mathbf{x}) \mathbf{A}_b(\mathbf{x}) \nabla \psi(\mathbf{x}) d^3x + \int \psi^+(\mathbf{x}) \mathbf{A}_{b^+}(\mathbf{x}) \nabla \psi(\mathbf{x}) d^3x. \quad (44.17)$$

Структуру гамильтониана $H_{\text{эл.-св}}$, которую он принимает при подстановке разложений (44.7), (44.16), (44.11а, б) в (44.17), мы обсудим на примере первого интеграла, показав при этом, на что

заменяется каждый член подынтегрального выражения:

$$\left. \begin{array}{ccccccc} \int \psi^+ (\mathbf{x}) & \Lambda_b (\mathbf{x}) & \nabla & \psi (\mathbf{x}) & d^3 x \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \int a_{\mu}^+ \varphi_{\mu}^* (\mathbf{x}) & b_{\mathbf{k}, j} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} & \nabla & a_{\nu} \varphi_{\nu} (\mathbf{x}) & d^3 x \end{array} \right\}. \quad (44.18)$$

Поскольку операторы a_{μ}^+ , $b_{\mathbf{k}, j}$, a_{ν} не связаны с интегрированием, их можно вынести из-под знака интеграла:

$$a_{\mu}^+ a_{\nu} b_{\mathbf{k}, j} \int \varphi_{\mu}^* (\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \nabla \varphi_{\nu} (\mathbf{x}) d^3 x. \quad (44.19)$$

Те же шаги можно предпринять и в отношении второго интеграла в (44.17), причем для этого следует лишь в конечном результате (44.19) заменить b на b^+ и $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ на $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}$. Чтобы получить полное выражение для $H_{\text{эл-св}}$, нам следует еще добавить постоянные множители, которые стоят в (44.7) и (44.66), а затем провести суммирование по μ , ν , \mathbf{k} , j . Тогда получим

$$\left| H_{\text{эл-св}} = \hbar \sum_{\mu\nu\mathbf{k}j} (a_{\mu}^+ a_{\nu} b_{\mathbf{k}, j} g_{\mu\nu\mathbf{k}j} + a_{\mu}^+ a_{\nu} b_{\mathbf{k}, j}^+ g'_{\mu\nu\mathbf{k}j}). \quad (44.20) \right.$$

Полный оператор Гамильтона, который мы положим в основу нашего дальнейшего рассмотрения, дается выражением

$$H = H_0 + H_{\text{эл-св}} + H_{\text{вз}}, \quad (44.21)$$

где H_0 , $H_{\text{эл-св}}$ и $H_{\text{вз}}$ заданы явно в (44.15), (44.20), (44.6г).

Константы связи g даются следующим выражением:

$$g_{\mu\nu\mathbf{k}j} = - \underbrace{\sqrt{\frac{2\pi}{V\omega_{\mathbf{k}}\hbar}} \cdot \frac{e}{m}}_{=\text{const}} \int \varphi_{\mu}^* (\mathbf{x}) \mathbf{e}_{\mathbf{k}, j} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{\hbar}{i} \nabla \varphi_{\nu} (\mathbf{x}) d^3 x. \quad (44.22)$$

Константы связи g' получаются из констант g простой заменой \mathbf{k} на $-\mathbf{k}$:

$$g'_{\mu\nu\mathbf{k}j} = g_{\mu\nu, -\mathbf{k}j}.$$

В приведенных выше вычислениях мы пренебрегли в (44.9) квадратичным по Λ членом. Можно действительно показать, что в целом ряде случаев это пренебрежение оправдано. Но поскольку в некоторых случаях, особенно в нелинейной оптике, этот член играет важную роль, то мы рекомендуем читателю в виде упражнения найти его явный вид.

По своей структуре оператор Гамильтона (44.10) с (44.15) и (44.20) полностью аналогичен встречавшемуся уже нам гамильтониану, который описывает взаимодействие между электроном и колебаниями решетки. Тогда операторы рождения и уничтожения относились к квантам колебаний решетки. В данном же слу-

чае константы связи имеют совершенно иной смысл. Другое различие состоит в том, что в проблеме взаимодействия между электронами и колебаниями решетки речь шла об электронах, которые движутся в периодическом с периодом решетки потенциале. В данном случае потенциал $V(\mathbf{x})$ может быть любым.

Задания к § 44:

1. Получить соответствующие (44.1) уравнения Гамильтона для \mathbf{p} и \mathbf{x} и вывести отсюда уравнения движения Ньютона, где в качестве силы выступает сила Лоренца $\mathbf{K} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v}, \mathbf{B}]$.

При этом учесть, что $e\mathbf{E} = -\text{grad } V - \frac{e}{c}\dot{\mathbf{A}}$, а также $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$.

2. Выразить (44.6в) через операторы a^+ , a , b^+ , b , применив разложения (44.7), (44.11а), (44.11б).

§ 45. Поляритоны

Под поляритонами понимают возбужденные состояния, возникающие в решетке кристалла в результате взаимодействия между светом и электронами. Как мы уже видели на примере экситона Френкеля, в кристалле могут возникать поляризационные колебания электронов, которые распространяются в кристалле в виде продольных и поперечных волн. Если на кристалл падает свет, то, как мы сейчас увидим, и в этом случае в кристалле могут возбуждаться аналогичные поперечные поляризационные колебания. Возникающие при этом процессы сильно напоминают два связанных маятника, причем в нашем случае один маятник представляет поляризационные колебания, а другой — колебания поля излучения. Как нам известно из механики, два связанных маятника, которые в отсутствие связи имеют собственные частоты ω_1 и ω_2 , совершают общее движение, причем новые собственные колебания происходят с новыми собственными частотами Ω_1 и Ω_2 .

Совершенно аналогичная ситуация возникает и в рассматриваемом нами квантовомеханическом случае. Благодаря взаимодействию между светом и экситонами Френкеля возникают новые стационарные состояния с новыми энергиями и новым законом дисперсии. Чтобы не слишком перегружать формализм всевозможными индексами, мы рассмотрим сравнительно простую конфигурацию. Пусть атомы расположены в плоскостях перпендикулярно оси x . Атомные волновые функции, из которых образуется полоса проводимости, пусть будут p -функциями, ориентированными либо вдоль, либо поперек оси x . Пусть волна излучения падает параллельно оси x и поляризована параллельно оси y (рис. 59). Исходным пунктом нашего рассмотрения явля-

ется оператор Гамильтона (44.9) (с (44.6), (44.8)), причем нелинейный член опущен нами еще в § 44. По аналогии с § 44 снова введем для \mathbf{A} разложение (44.7). Поскольку мы рассматриваем только одно направление поляризации, индекс j теперь можно опустить. В отличие от § 44, однако, мы разложим полевые операторы электронов ψ и ψ^+ по локализованным в узлах решетки \mathbf{l} функциям:

$$w_{\mu}(\mathbf{x} - \mathbf{l}). \quad (45.1)$$

При этом речь может идти либо о функциях Ванье (см. § 19), либо, в простейшем случае, об атомных волновых функциях. Ин-

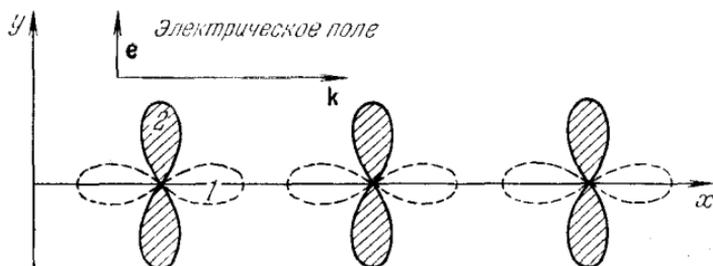


Рис. 59. Рассматриваемая в тексте конфигурация электрического поля, волны излучения и функций Ванье зоны проводимости. \mathbf{e} — направление вектора поляризации, \mathbf{k} — волновой вектор.

декс μ показывает, о каком состоянии идет речь: об основном или о возбужденном. Будем считать, что основное состояние принадлежит валентной зоне и поэтому в данном случае индекс μ соответствует индексу V . Соответствующие волновые функции имеют s -симметрию. Индекс μ может обозначать также и возбужденное состояние, которое принадлежит зоне проводимости. Поскольку мы считаем, что функции возбужденного состояния имеют вид p -функций, то нам следует ввести дополнительно индексы 1, 2 и 3 в соответствии с возможными пространственными ориентировками p -функций. В этом случае μ принимает следующие значения: $\mu = L, 1$ или $\mu = L, 2$, или $\mu = L, 3$.

Если разложение

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{1, \mu} a_{1, \mu} w_{\mu}(\mathbf{x} - \mathbf{l}) \quad (45.2)$$

и соответствующее ему разложение для эрмитово сопряженного оператора подставить в оператор Гамильтона (44.9), то мы получим новый оператор Гамильтона

$$H = H_{\text{эл}} + H_{\text{св}} + H_{\text{эл-св}}. \quad (45.3)$$

Здесь $H_{\text{эл}}$ зависит от операторов $a_{1, \mu}^+$ и $a_{1, \mu}$. Этот оператор может также содержать выражения, описывающие кулоновское

взаимодействие между электронами. Явный вид этого оператора, который здесь нам совершенно не нужен, можно найти, например, в § 24. $H_{св}$ описывает энергию свободного поля излучения и дается выражением (44.8). Третий оператор Гамильтона в (45.3) описывает взаимодействие между электроном и излучением. Рассмотрим $H_{эл-св}$ более подробно и разложим его на две части.

Первая часть содержит только операторы уничтожения квантов поля излучения и поэтому представляет поглощение излучения

$$H_{эл-св,погл} = \hbar \sum_{1,1',\mu,\mu',\mathbf{k}} a_{1,\mu}^{\dagger} a_{1',\mu'} b_{\mathbf{k}} G_{1,\mu,1',\mu',\mathbf{k}}. \quad (45.4)$$

Вторая часть содержит только операторы рождения

$$H_{эл-св,исп} = \hbar \sum_{1,1',\mu,\mu',\mathbf{k}} a_{1,\mu}^{\dagger} a_{1',\mu'} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} G'_{1,\mu,1',\mu',\mathbf{k}} \quad (45.5)$$

и, тем самым, представляет процессы испускания квантов света. Суммы в (45.4) и (45.5) распространяются на все точки локализации электронов 1 и $1'$, а также на все возможные значения индексов μ и μ' , которые отличают валентную зону от зоны проводимости. Наконец следует просуммировать по всем векторам \mathbf{k} поля излучения. При этом для простоты мы примем, что \mathbf{k} параллелен оси x и что имеется лишь одно направление поляризации. Матричные элементы G в (45.4) и (45.5) имеют вид

$$G_{1,\mu,1',\mu',\mathbf{k}} = \text{const} \int w_{\mu}^*(\mathbf{x} - 1) \mathbf{e}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \frac{\hbar}{i} \nabla w_{\mu'}(\mathbf{x} - 1') d^3x, \quad (45.6)$$

причем константа в (45.6) совпадает с константой в (44.22). Мы не вводим ее здесь, поскольку ее явный вид в последующем изложении нам не понадобится. Посмотрим, как упрощается G в нашей конкретной модели. Предположим, что между атомными волновыми функциями в различных узлах нет перекрытия. Тогда от нуля отличны только такие матричные элементы G , для которых $1' = 1$. Далее, волновой вектор излучения \mathbf{k} по величине значительно меньше постоянной решетки. Тогда $e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ внутри элементарной ячейки можно считать константой, что позволяет в показателе экспоненты заменить \mathbf{x} на 1 и вынести $e^{i\mathbf{k}1}$ за знак интеграла:

$$G \sim e^{i\mathbf{k}1} \mathbf{e}_{\mathbf{k}} \int w_{\mu}^*(\mathbf{x} - 1) \frac{\hbar}{i} \nabla w_{\mu'}(\mathbf{x} - 1) d^3x. \quad (45.7)$$

Введем, наконец, следующее правило отбора для атомных волновых функций: переходы могут происходить только между основным и возбужденным состояниями, но не между одинаковы-

ми состояниями (см. также стр. 192—193):

$$\left. \begin{aligned} \mu = V, \quad \mu' = L, \\ \mu = L, \quad \mu' = V. \end{aligned} \right\} \quad (45.8)$$

Поэтому ниже нам следует учесть только матричные элементы вида

$$G \sim e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}} p_{V, L}, \quad (45.9)$$

где $p_{V, L}$ — матричный элемент оператора импульса между основным состоянием, имеющим s -характер, и возбужденным состоянием, которое имеет p -характер. Учитывая ориентацию атомных волновых функций и поляризацию электрического поля, находим, что от нуля отличен только такой множитель G , для которого соответствующие волновые функции ориентированы вдоль оси y :

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}} p_{V, L} = p_y. \quad (45.10)$$

Следствием этого, как мы еще увидим, является то, что поперечное поле излучения вступает во взаимодействие только с поперечными экситонами Френкеля. Поэтому G можно записать в следующем виде:

$$G = \frac{1}{\sqrt{N}} D e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}, \quad (45.11)$$

причем мы учли, что от нуля отличны только совершенно определенные коэффициенты G . Величина N в множителе $1/\sqrt{N}$ является полным числом атомов в решетке; оно понадобится нам сейчас.

С хорошей точностью можно принять, что константа D в (45.11) практически не зависит от \mathbf{k} . Совершенно аналогичным образом найдем для G' следующее выражение:

$$G' = \frac{1}{\sqrt{N}} D e^{-i\mathbf{k}\mathbf{l}}. \quad (45.12)$$

Ради простоты здесь и ниже мы примем, что константа D действительна. (Этого всегда можно добиться соответствующим выбором атомных волновых функций.) После этих приготовлений мы в состоянии представить оператор Гамильтона (45.4) и (45.5) в существенно более простом виде. Например, вместо (45.4) мы

получаем

$$H_{\text{эл-св, погл}} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \underbrace{\sum_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l},L,y}^+ a_{\mathbf{l},V} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}}_{B_{\mathbf{k}}^+} \frac{1}{\sqrt{N}} D + \\ + \hbar \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \underbrace{\sum_{\mathbf{l}} a_{\mathbf{l},V}^+ a_{\mathbf{l},V,y} e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}}_{B_{-\mathbf{k}}} \frac{1}{\sqrt{N}} D. \quad (45.13)$$

В (45.13) стоит сумма по \mathbf{l} , которая уже встречалась нам при рассмотрении экситонов Френкеля. Вспомним теперь, что вместо оператора уничтожения $a_{\mathbf{l},V}$ мы ввели оператор электронной дырки $a_{\mathbf{l}}^+$ и тогда сумма по \mathbf{l} совпадает, как указано, с оператором рождения экситона Френкеля с волновым вектором \mathbf{k} . Соответственно во второй строке (45.13) получаем выражение для оператора уничтожения экситона Френкеля. С помощью этих выражений (45.13) принимает более простой вид

$$H_{\text{эл-св, погл}} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^+ D + \hbar \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} B_{-\mathbf{k}} D. \quad (45.14)$$

Совершенно аналогичным образом для (45.5) получаем следующий оператор Гамильтона:

$$H_{\text{эл-св, исп}} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ B_{\mathbf{k}} D + \hbar \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ B_{-\mathbf{k}}^+ D. \quad (45.15)$$

Как мы только что видели, кажется естественным вместо операторов рождения и уничтожения электронов ввести операторы рождения и уничтожения экситонов Френкеля. Мы рассматриваем ситуацию, когда экситоны Френкеля образуются в решетке без взаимодействия с излучением. Тогда, согласно результатам § 24, мы знаем, что с помощью введения операторов для экситонов Френкеля оператор $H_{\text{эл}}$ можно представить в виде

$$H_{\text{эл}} = \hbar \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^+ B_{\mathbf{k}}. \quad (45.16)$$

Таким образом, нам удалось привести исходный оператор Гамильтона нашей системы «электроны — поле излучения» к весьма простому виду

$$H = \hbar \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^+ B_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{k}} D (b_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^+ + b_{\mathbf{k}} B_{-\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^+ B_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^+ B_{-\mathbf{k}}^+) \right\}. \quad (45.17)$$

В принципе этот оператор Гамильтона содержит три части: энергию экситонов Френкеля, которые ведут себя как бозе-частицы,

энергию поля излучения и энергию взаимодействия между полем излучения и операторами Бозе. Для каждого фиксированного значения волнового вектора \mathbf{k} существует связь между осциллятором, который порождается полем электронов, и осциллятором поля излучения. Уравнение Шредингера, соответствующее (45.17), можно решить *точно*.

Ниже мы рассмотрим, чтобы не иметь дела со слишком сложной ситуацией, приближенное решение. Как видно из оператора взаимодействия (45.17), здесь возникают различные процессы взаимодействия; среди них процесс, при котором одновременно рождаются квант света и один экситон Френкеля или оба одновременно уничтожаются. Согласно закону сохранения энергии такой процесс невозможен. В силу этого соответствующими членами мы пренебрежем, хотя в более высоких порядках приближения они, вообще говоря, дают вклады. Поэтому мы рассмотрим несколько упрощенную модель, которая, однако, весьма хорошо согласуется с действительностью. Итак, вместо (45.17) мы рассмотрим оператор Гамильтона

$$H = \sum_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}}, \quad (45.18)$$

где члены суммы по \mathbf{k} имеют вид

$$H_{\mathbf{k}} = \hbar(\varepsilon_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + D b_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^{\dagger} + D b_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}}). \quad (45.19)$$

Поскольку сумма (45.18) представляет собой сумму по отдельным операторам Гамильтона, которые описывают независимые друг от друга системы, то достаточно показать, как следует решить уравнение Шредингера, соответствующее одному оператору (45.19). При этом ради простоты в дальнейшем изложении мы опустим индекс \mathbf{k} . Этот пример показывает нам, как рассматриваются проблемы, гамильтонианы которых содержат билинейные комбинации бозе-операторов. (Здесь речь идет о квантовомеханическом рассмотрении связанных маятников, так что упомянутая в начале этого параграфа аналогия действительно очень тесная.)

Теперь введем новые операторы P_1 и P_2 так, чтобы оператор Гамильтона принял вид

$$H_{\mathbf{k}} = \hbar\Omega_1 P_1^{\dagger} P_1 + \hbar\Omega_2 P_2^{\dagger} P_2. \quad (45.20)$$

Для этого положим

$$B = u_{11} P_1 + u_{12} P_2, \quad b = u_{21} P_1 + u_{22} P_2, \quad (45.21)$$

или, в матричных обозначениях,

$$\begin{pmatrix} B \\ b \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}, \quad (45.22)$$

где, естественно,

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix}.$$

Гамильтониан (45.19) также перепишем в матричном виде

$$H_k = (B^+, b^+) (A) \begin{pmatrix} B \\ b \end{pmatrix}, \quad (45.23)$$

где A — квадратная матрица. Если выполнить операции умножения в (45.23), то получим

$$(B^+, b^+) \begin{pmatrix} a_{11} B + a_{12} b \\ a_{21} B + a_{22} b \end{pmatrix} = a_{11} B^+ B + a_{12} B^+ b + a_{21} b^+ B + a_{22} b^+ b. \quad (45.24)$$

Сравнение (45.24) и (45.19) дает коэффициенты матрицы (A)

$$a_{11} = \varepsilon, \quad a_{22} = \omega, \quad a_{12} = a_{21} = D. \quad (45.25)$$

Если подставить (45.22) в (45.23), то вместо старых операторов B и b появятся новые операторы P_1 и P_2 . Чтобы привести оператор Гамильтона к виду (45.20), потребуем, чтобы матрица

$$U^{-1} A U \quad (45.26)$$

была диагональной, что, как известно, тождественно проблеме отыскания собственных значений

$$A U = U \Lambda, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \Omega_1 & 0 \\ 0 & \Omega_2 \end{pmatrix}. \quad (45.27)$$

Если вместо A и U подставить матричные элементы, то уравнения примут следующий явный вид:

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \Omega_j) u_{1j} + D u_{2j} &= 0, \\ D u_{1j} + (\omega - \Omega_j) u_{2j} &= 0, \quad j = 1, 2. \end{aligned} \quad (45.28)$$

Нас интересуют в конечном счете собственные значения Ω_j . Они имеют вид

$$\left| \quad \Omega_{1,2} = \frac{\omega + \varepsilon}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\omega - \varepsilon)^2 + 4D^2}. \quad (45.29) \right.$$

С помощью этих собственных значений оператор Гамильтона можно представить в желаемом виде (45.20). Добавим всюду, где это необходимо, индекс k . Тогда H (45.18) окончательно принимает следующий вид:

$$\left| \quad H = \hbar \sum_k (\Omega_{1,k} P_{1k}^+ P_{1k} + \Omega_{2,k} P_{2k}^+ P_{2k}). \quad (45.30) \right.$$

Операторы P_{1k} и P_{2k} при этом соответствуют классическим нор-

мальным координатам. Отсюда ясно видно, что два связанных колебания порождают новую форму колебания.

Как можно показать, преобразование U можно выбрать так, что оно будет унитарным. Тогда, пользуясь унитарностью преобразования U , можно показать, что операторы P удовлетворяют обычным бозевским перестановочным соотношениям. (См. к этому § 16.)

Новые и старые собственные значения представлены на рис. 4. Как можно видеть, дисперсионные кривые для экситонов и света в точке пересечения расщепляются и возникают две новые дисперсионные кривые. Элементарные возбуждения, которые описываются этими дисперсионными кривыми, называются поляритонами. Существование поляритонов было доказано экспериментально. Согласно этим дисперсионным кривым, поляритоны могут распространяться в кристалле с совершенно различными по величине скоростями. Из-за тесной связи поляритонов с электромагнитным полем в кристалле возникают дисперсионные эффекты нового типа.

Мы рассматривали в этом параграфе взаимодействие света с экситонами Френкеля только ради простоты. Наше рассмотрение без труда можно перенести, например, на случай экситонов Ваннье.

ЛИТЕРАТУРА ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ЧТЕНИЯ

К § 2

Volz H. Einführung in die Theoretische Mechanik, II. Lagrange-Hamiltonsche Mechanik und Ansatzpunkte der Quantentheorie.— Frankfurt/M.: 1972.

*) *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика.— М.: Физматгиз, 1965.

*) *Лич Дж. У.* Классическая механика.— М.: ИЛ, 1961.

К главе II

Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики, 5-е изд.— М.: Высшая школа, 1976.

Döring W. Einführung in die Quantenmechanik, 3. Aufl.— Göttingen: 1962.

Давыдов А. С. Квантовая механика.— М.: Наука, 1973.

Fick E. Einführung in die Grundlagen der Quantenmechanik.— Frankfurt/M.: 1968.

Franz W. Quantentheorie.— Berlin — Heidelberg — New York: 1971.

Mitter H. Quantentheorie.— Mannheim: 1969.

Süssmann G. Einführung in die Quantenmechanik, I.— Mannheim: 1963.

К главе III

а) Распространение волн в периодических структурах, классическая теория:

Brillouin L. Wave Propagation in Periodic Structures.— New York: 1948.

Русский перевод 2-го издания: *Бриллюэн Л., Пароди М.*, Распространение волн в периодических структурах.— М.: ИЛ, 1959.

Maradudin A. A., Montroll E. W., Weiss G. H. Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation.— New York: 1963. Русский перевод:

Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении.— М.: Мир, 1965.

б) Квантование поля:

Schweber S. An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory.— Evanston, Ill.: 1961. Русский перевод: *Шебер С.* Введение в релятивистскую квантовую теорию поля.— М.: ИЛ, 1963.

Wentzel G. Einführung in die Quantentheorie der Wellenfelder.— Wien: 1942. Русский перевод: *Вентцель Г.* Введение в квантовую теорию волновых полей.— М.: Гостехиздат, 1947.

Henley E., Thirring W. Elementary Quantum Field Theory.— New York: 1962. Русский перевод: *Хенли Э., Тирринг В.* Элементарная квантовая теория поля.— М.: ИЛ, 1963.

Mandel F. Introduction to Quantum Field Theory.— New York: 1965.

*) Добавлено при переводе. (Прим. перев.)

Общая литература к главам IV—VIII

а) Введения в физику твердого тела:

- Azaroff L. V.* Introduction to Solids.— New York — Toronto — London: 1960.
- Brophy J. J.* Electronic Processes in Materials.— New York — Toronto — London: 1963.
- Blakemore J. S.* Solid State Physics.— Philadelphia — London — Toronto: 1969.
- Hellwege K. H.* Einführung in die Festkörperphysik, I, II.— Berlin — Heidelberg — New York: Springer, 1968, 1970. Heidelberger Taschenbücher, Bd. 33, 34.
- Kittel C.* Introduction to Solid State Physics.— New York: 1966. Русский перевод: *Куммель Ч.* Введение в физику твердого тела.— М.: Физматгиз, 1963.
- Kittel C.* Introduction to Solid State Physics, 4 Ed.— New York: 1971. Русский перевод: *Куммель Ч.* Введение в физику твердого тела.— М.: Физматгиз, 1978.
- Madelung O.* Grundlagen der Halbleiterphysik.— Berlin — Heidelberg — New York: 1970.
- Levy R. A.* Principles of Solid State Physics.— New York — London: 1968.
- Wert Ch. A., Thomson R. M.* Physics of Solids.— New York — Toronto — London: 1964. Русский перевод: *Уэрт Ч. А., Томсон Р. М.* Физика твердого тела.— М.: Мир, 1969.

б) Введения в теорию твердого тела:

- Anderson P. W.* Concepts in Solids.— New York: 1963.
- Beam W. R.* Electronics of Solids.— New York — Toronto — London: 1965.
- Becker R., Sauter F.* Theorie der Elektrizität, Bd. 3: Elektrodynamik der Materie.— Stuttgart: 1969.
- Brauer W.* Einführung in die Elektronentheorie der Metalle.— Braunschweig: 1966.
- Callaway J.* Energy Band Theory.— New York: 1964. Русский перевод: *Каллуэй Дж.* Теория энергетической зонной структуры.— М.: Мир, 1969.
- Clark H.* Solid State Physics.— New York: 1968.
- Fröhlich H.* Elektronentheorie der Metalle, Nachdruck.— Berlin — Heidelberg — New York: 1970.
- Goldsmid H. J.* Problems in Solid State Physics.— New York: 1968.
- Harrison W. A.* Solid State Theory.— New York — Toronto — London: 1969. Русский перевод: *Харрисон У.* Теория твердого тела.— М.: Мир, 1972.
- Harrison W. A.* Pseudopotentials in the Theory of Metals.— New York: 1966. Русский перевод: *Харрисон У.* Псевдопотенциалы в теории металлов.— М.: Мир, 1968.
- Haug A.* Theoretische Festkörperphysik, Bd. I, II.— Wien: 1964, 1970.
- Jones H.* The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals.— Amsterdam — New York: 1960. Русский перевод: *Джонс Г.* Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах.— М.: Мир, 1968.
- Joshi S. K., Rajagopal A. K.* Lattice Dynamics of Metals.— New York — Toronto — London: 1968, p. 159. Solid State Physics, Vol. 22.
- Kittel C.* Quantum Theory of Solids.— New York: 1963. Русский перевод: *Куммель Ч.* Квантовая теория твердых тел.— М.: Наука, 1967.
- Kubo R., Nagamiya T.* Solid State Physics.— New York — Toronto — London: 1969.
- Ludwig W.* Einführung in die Festkörperphysik I, II.— Frankfurt/M.: 1970.
- Mott N., Jones W.* The Theory of Properties of Metals and Alloys.— London: 1958.
- Patterson J. D.* Introduction to the Theory of Solid State Physics.— London: 1971.

- Peterls R. E.* Quantum Theory of Solids.— London: 1955. Русский перевод: *Пайерлс Р.* Квантовая теория твердых тел.— М.: ИЛ, 1956.
- Pines D.* Elementary Excitations in Solids.— New York: 1963. Русский перевод: *Пайнс Д.* Элементарные возбуждения в твердых телах.— М.: Мир, 1965.
- Seitz F.* The Modern Theory of Solids.— New York — Toronto — London: 1940. Русский перевод: *Зейтц Ф.* Современная теория твердого тела.— М.: Гостехиздат, 1949.
- Sachs M.* Solid State Theory.— New York — Toronto — London: 1963.
- Sham L. J., Ziman J. M.* The Electron-Phonon Interaction.— New York: 1963, p. 221. Solid State Physics, Vol 15.
- Slater J. C.* Quantum Theory of Molecules and Solids, 3 Vol.— New York — Toronto — London: 1965—1967.
- Smith R. A.* Wave Mechanics of Crystalline Solids, 2. Ed.— London: 1969.
- Sommerfeld A., Bethe H.* Elektronentheorie der Metalle.— Berlin — Heidelberg — New York: 1967; Heidelberger Taschenbuch Nr 19; Geiger-Scheel, Handbuch der Physik, Bd. 24/2, 1933. Русский перевод: *Бете Г., Зоммерфельд А.* Электронная теория металлов.— М.: Гостехиздат, 1938.
- Raimes S.* The Wave Mechanics of Electrons in Metals.— Amsterdam — New York: 1961.
- Taylor P. L.* A Quantum Approach to the Solid State.— Englewood Cliffs, N.J.: 1970.
- Wannier G. H.* Elements of Solid State Theory.— Cambridge: 1959.
- Weinreich G.* Solids, Elementary Theory for Advanced Students.— New York: 1965.
- Wilson A. H.* The Theory of Metals.— Cambridge: 1958. Русский перевод: *Вильсон А.* Квантовая теория металлов, пер. 1-го изд., М., 1941.
- Ziman J. H.* Electrons and Phonons.— London: 1960. Русский перевод: *Займан Дж.* Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах.— М.: ИЛ, 1962.
- Ziman J. H.* Principles of the Theory of Solids.— Cambridge: 1964. Русский перевод: *Займан Дж.* Принципы теории твердого тела.— М.: Мир, 1974.

в) Теория многих частиц и ее приложения к твердому телу:

- Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике.— М.: Физматгиз, 1962.
- Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В.* Метод функций Грина в статистической механике.— М.: Физматгиз, 1961.
- Mattuck R. D.* A Guide to Feynman Diagrams in the Many Body Problems.— New York — Toronto — London: 1967. Русский перевод: *Маттук Р.* Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел.— М.: Мир, 1969.
- Nozières Ph.* Theory of Interacting Fermi Systems.— New York: 1964.
- Pines D., Nozières Ph.* The Theory of Quantum Liquids, I.— New York: 1966. Русский перевод: *Пайнс Д., Нозьер Ф.* Теория квантовых жидкостей. Нормальные ферми-жидкости.— М.: Мир, 1967.
- Thouless D. J.* Quantenmechanik der Vielteilchensysteme.— Mannheim: 1964; VI Hochschultaschenbuch Nr. 52/52a. Русский перевод: *Таулес Д.* Квантовая механика систем многих частиц.— М.: ИЛ, 1963.
- March N. H., Young W. H., Sampanthar S.* The Many-Body-Problem in Quantum Mechanics.— Cambridge: 1967. Русский перевод: *Марч Н., Янг У., Сампантхар С.* Проблема многих тел в квантовой механике.— Мир, 1969.
- Schulz T. D.* Quantum Field Theory and the Many-Body-Problem.— New York: 1964.

Специальная литература к отдельным параграфам глав IV—VIII

Экситоны:

- Knox R. S.* Theory of Excitons.—New York—London: 1963. Русский перевод:
Нокс Р. С. Теория экситонов.— М.: Мир, 1966.
Dexter D. L., Knox R. S. Excitons.— New York — London — Sydney: 1965.
Kuper C., Whitfield G. D. Polarons and Excitons.— Edinburgh — London:
 1963.

Спиновые волны:

- Mattis D. C.* The Theory of Magnetism.— New York: 1965. Русский перевод:
Маттис Д. Теория магнетизма, М.: Мир, 1967.
Thompson E. D. Unified Model of Ferromagnetism, in: Advances in Physics,
 Vol. CIV, 1965, p. 213.
Walker L. R. Magnetism/ed. by T. Rado; Suhl, H.— New York: 1963, p. 299.
Ахизезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. Спиновые волны.—
 М.: Наука, 1967.

Поляроны:

- Kuper C. G., Whitfield G. D.* Polarons and Excitons.— Edinburgh — London:
 1963.

Сверхпроводимость:

- de Gennes P. G.* Superconductivity of Metals and Alloys (transl. by P. A. Pin-
 cus).— New York: 1966. Русский перевод: *Де Жен П.* Сверхпроводимость
 металлов и сплавов.— М.: Мир, 1968.
Parks R. D. Superconductivity.— New York: 1969.
Rickayzen G. Theory of Superconductivity.— New York: 1965.
Schrieffer J. R. Theory of Superconductivity.— New York: 1964. Русский пе-
 ревод: *Шриффер Дж.* Теория сверхпроводимости.— М.: Наука, 1970.

К главе VIII

- Haken H.* Laser Theory.— Berlin — Heidelberg — New York: 1970; Hand-
 buch der Physik, Bd. XXV/2c.

Поляритоны:

- Hopfield J. J.* Theory of the Contribution of Excitons to the Complex Dielectric
 Constant of Crystals.— Phys. Rev., 1956, 112(5), p. 1555.
Пекар С. И.— ЖЭТФ, 1957, 33, с. 1022.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

a — постоянная решетки, оператор уничтожения для ферми-частиц
 a^+ — оператор рождения ферми-частиц
 $a_{k,L}, a_{k,V}$ — операторы уничтожения, относящиеся к зоне проводимости и валентной зоне соответственно*)
 A — оператор, амплитуда
 Λ — векторный потенциал
 b^+, b — операторы рождения и уничтожения бозе-частиц
 B^+, B — операторы рождения и уничтожения электронно-дырочной пары
 B — плотность магнитного потока
 c — постоянная, скорость света
 c_n — коэффициент разложения
 d^+, d — операторы рождения и уничтожения дырок
 $D_{j,j'}$ — дипольный матричный элемент
 D — плотность электрического смещения
 $D(\epsilon)$ — плотность состояний вблизи уровня Ферми
 $\delta_{kk'}$ — символ Кронекера
 $\delta(x-x')$ — δ -функция Дирака
 $\delta^{(n)}(x-x')$ — n -я производная δ -функция Дирака
 Δ — оператор Лапласа, параметр энергетической щели
 Δx — малое приращение координаты
 e — элементарный электрический заряд
 e — вектор поляризации
 ϵ — диэлектрическая постоянная
 ϵ_k — частота k -го собственного состояния

E — энергия
 E — напряженность электрического поля
 f — коэффициент упругой связи
 f^k, f_k^0 — функция распределения электронов, функция распределения Ферми
 $f(x)$ — обычно обозначает какую-либо функцию
 F — сила
 $\Phi(x)$ — классическая и квантовомеханическая волновая функция
 Φ_μ — полный набор собственных функций
 Φ, ψ, χ — волновые функции, функции состояния
 $\Phi_0, \Phi_g, \Phi_{осн}$ — основное состояние
 Φ_V — функция состояния заполненной валентной зоны
 $\Phi(\uparrow), \Phi(\downarrow)$ — собственные функции z -компонент оператора спина
 g — ускорение свободного падения, константа связи
 G — вес
 $G(x, t; x', t')$ — двухвременная функция Грина
 $h = 2\pi \hbar$ — планковский квант действия (постоянная Планка)
 H — функция или оператор Гамильтона
 $\mathcal{H}(x)$ — плотность гамильтониана
 \tilde{H} — оператор Гамильтона в представлении взаимодействия
 i — мнимая единица
 $J_{l,m}$ — обменное взаимодействие
 Im — мнимая часть
 j — плотность электрического тока
 k_B — постоянная Больцмана

*) В этой книге, в отличие от обычно принятых в отечественной литературе индексов валентной зоны и зоны проводимости v и l , используются индексы V и L . (Прим. перев.)

\mathbf{k} — волновой вектор
 \mathbf{K}, K — сила, силовая константа
 l — индекс, обычно обозначающий положение в решетке
 L — функция Лагранжа (лагранжиан), линейная протяженность области квантования
 $\mathcal{L}(x)$ — плотность функции Лагранжа, плотность лагранжиана
 λ — длина волны, глубина проникновения
 m, M — масса частицы
 $m^*, m_{\text{эфф}}, m_e, m_d$ } — эффективная масса электронов или дырок
 μ — магнитная восприимчивость
 n — целое число, плотность частиц
 n_h — число заполнения
 N — полное число частиц
 \mathcal{N} — постоянная нормировки
 ω — круговая частота
 Ω — круговая частота, какой-либо оператор
 p, \mathbf{p} — импульс
 P_1, P_2 — поляритонные операторы
 $\mathbf{P}(x)$ — поляризация
 Π — произведение, канонически сопряженный импульс
 q — амплитуда колебаний
 $Q(x, t)$ — поле колебаний решетки
 Re — действительная часть
 $\rho(x)$ — плотность массы, заряда, оператор плотности числа частиц
 s — натяжение струны
 s_x, s_y, s_z } — операторы спина
 s^+, s^- }
 $S_{\mathbf{k}}^+, S_{\mathbf{k}}^-$ — операторы спиновой волны
 Σ — сумма
 $\sigma^+, \sigma^-, \sigma_z, \sigma_x, \sigma_y$ — матрицы Паули

$\sigma_{\lambda\mu}$ — тензор проводимости
 t — временная переменная
 T — кинетическая энергия, температура, оператор времени упорядочения
 T_l — оператор трансляции
 $u_k(x)$ — функция Блоха
 U — энергия электромагнитного поля, унитарное преобразование
 v — скорость частиц, скорость звука, постоянная связи
 V — объем, потенциальная энергия
 ΔV — элемент объема
 \mathbf{w} — волновой вектор фононов
 $W(x)$ — потенциал
 $w_L(x-l)$ } — функции Ванье зоны проводимости и
 $w_V(x-l)$ } валентной зоны
 $W_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}$ — вероятность перехода в единицу времени
 $W \left(\begin{array}{cc|cc} k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \\ j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \end{array} \right)$ — матричный элемент кулоновского взаимодействия в зонной модели
 $\mathbf{x}, (x, y, z)$ — радиус-вектор в декартовой системе координат
 ξ — длина когерентности, координата
 $\tilde{\Phi}$ — волновая функция в представлении взаимодействия
 δ — вариационная производная
 $\delta q(x)$ — обозначение совокупности координат
 $\bar{\Omega}$ — квантовомеханическое среднее
 $\theta(t-t')$ — ступенчатая функция Хевисайда

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Амплитуда вероятности 108
Антинормально упорядоченная функция 40
Антисимметричная волновая функция 111
Атомная цепочка линейная 55
- Блоховская волна 142
Бозе-операторы 37
— частицы 51
Бозоны 94, 100
Бра 33
- Вакуумное состояние 99
Валентная зона 143
Вариационная производная 72
Векторный потенциал 85
Вероятность перехода полная 108
Вершина 229
Взаимодействие полей 123
— точечных зарядов 196
— электронов с квантованным полем излучения 319
— — — — колебаний решетки 219
Внутреннее поле 207
Волновое уравнение, квантование 83
— — одномерное 68
— — трехмерное 83
Время жизни полярона 292
— соударения 240
- Гармонический осциллятор 21
— — под внешним воздействием 47
Глубина проникновения 296
Граничные условия циклические 68
Групповая скорость 143
- Двухатомная линейная цепочка 62
Двухуровневый атом во внешнем электрическом поле 123
 δ -функция Дирака 71
— —, представления 76
— —, производные 76
- Диаграммы 229
— связанные 255
Длина когерентности 298
— свободного пробега средняя 242
- Закон дисперсии волны в атомной цепочке 57
— — для двухатомной линейной цепочки 62
— — — одномерного континуума 69
— — скалярного волнового уравнения 85
— Ома 241
Запрещенная зона 143
Звуковые волны 11
Зоны энергетические 142
- Измеримые величины 31
Изолятор 144
Испускание виртуальное 230
— индуцированное фононов 226, 232
— фонона спонтанное 228
- Калибровочное преобразование 86
Канонически сопряженный импульс в континууме 73
к-правило отбора 144
Квазичастица 280
Квантование волнового уравнения 87
— шредингеровского волнового поля 98
— — —, подчиняющегося статистике Ферми — Дирака 104
— — —, — — —, вторичное 94
— электромагнитного поля 86
Кет 33
Когерентные состояния 50, 66, 81
Колебания ионов в F -центре (центр окраски) 48
Конденсация Бозе — Эйнштейна 198
Кронекера символ 27
Кулоновская калибровка 86
— обменная энергия 102
Кулоновский оператор 103
Кулоновское обменное взаимодействие 158, 172
Кушеровская шара 306
- Магнетон Бора 207
Магنون 14, 207
Матричный элемент гармонического осциллятора 36

- Метод Ли — Лоу — Пайнса 259
 — Эрэнрейха — Козна 201
 Модель Гайтлера — Лондона 207
 Молекула водорода 207
 Молекулярный кристалл 182
- Наложение волновых функций 38
 Нормально упорядоченная функция 39
 Нормировочный множитель осцилляторной функции 34
 Нулевая энергия 27, 29
 — — электромагнитного поля 92
- Обменный интеграл 209
 — оператор Гамильтона 210
 Оператор Гамильтона взаимодействия электронов с квантованным полем излучения 319
 — — колебаний атомной цепочки в континуальном пределе 79
 — — непрерывного распределения электронов 128
 — — — решетки и электронов в металлах 226
 — — несвязанных осцилляторов 26
 — — смещенных гармонических осцилляторов 53
 — — сверхпроводимости 306
 — — электронной дырки 163
 — — электронов и дырок 167
 — — поляризационных колебаний и электронов 222
 — координаты 101
 — Лапласа 83
 — отклонения 65
 — плотности числа частиц 100
 — рождения 21
 — трансляции 140
 — уничтожения 21
 — числа частиц 80
- Операторная функция 39
 — — экспоненциальная 39
- Основное состояние гармонического осциллятора 25
 — — сверхпроводника, энергия 313
- Перенормированная масса полярона 261
 Перенормировка массы 244, 250
- Перестановочные плюс-соотношения 105
 — соотношения в континуальном пределе 78
 — — для бозе-операторов 24, 28
 — — — гармонического осциллятора 22
- Перестановочные соотношения для операторов линейной цепочки 64
 — — — скалярного волнового уравнения 84
 — — — ферми-частиц 105
 — — — шредингеровского волнового поля 98
 — — — электромагнитного поля 89, 91
 — — между ψ и ψ^+ , фермионные 106
- Периодические граничные условия 55
- Плазменная частота 201
 Плазменные колебания 200
 Плазмон 16, 200
 Плотность гамильтониана 85
 — тока 297
- Поглощение 226
 Поглощения зона 144
 — кривая 144
- Поле 67
 —, квантование 55
- Полюс функции Грина 279
- Поляризационные волны 12
 — — электронные 191
 — колебания 12
 — —, квантование 219
- Поляризация, облако 250
 Поляритон 13, 324
 Полярный кристалл 219
 Полярон 16, 250, 258
 — электронный 251
- Поляроны, взаимодействие между ними 262
- Потенциал 17
 —, вид для смещенного гармонического осциллятора 48
- Потенциальная энергия во внешнем поле, оператор 102
- Правило вычисления волновых векторов 144
- Представление взаимодействия 130, 226
 — Гейзенберга 130
- Преобразование Боголюбова 117, 316
 — Хольштейна — Примакова 217
 — ферми-операторов линейное 116
- Приближение Боме — Пайнса 204
 — случайных фаз 205
- Примесный атом 54
- Принцип Кондона 54
 — Паули 100, 207
 — суперпозиции 57
- Проводимость 241
- Проводник 144
- Производная в континууме 72

- Пропагатор 275
 Разложение по собственным функциям 97, 127
 Сверхпроводимость 294
 Сверхпроводник, возбужденное состояние 314
 — жесткий 298
 — мягкий 298
 —, основное состояние по теории Бардина—Купера—Шриффера 305
 —, энергетическая щель 318
 Смещенный гармонический осциллятор 47
 Собственная функция гармонического осциллятора 26
 — энергия 26
 — —, диаграмма 274
 — — полярона 292
 — — частицы 195
 Собственное состояние несвязанных осцилляторов 29
 Собственные состояния уравнения Шредингера электромагнитного поля 92
 Состояние 24
 Спин 207
 — $1/2$ в магнитном поле 122
 Спиновые волны 14, 207, 214
 — операторы 209
 Среднее значение для фермионов 111
 — — амплитуды когерентного состояния 82
 — —, вычисление 31
 Ступенчатая функция 281
 — —, производная 282
 Суперпозиция волновых функций 38
 Сфера Ферми 14
T-оператор 280
T-произведение 281
 Температура перехода T_c 294
 Теорема Блоха 142
 Теория Блоха 140
 — возмущений в координатном пространстве 268
 — — нестационарная, второй порядок 244
 — — —, высшие порядки 251
 — — —, первый порядок 226
 Унитарное преобразование 44
 Упругая постоянная 21
 Уравнение Больцмана 239
 Уравнение вынужденных колебаний струны 125
 — движения Ньютона 17
 — — — атомной цепочки 55
 — колебаний свободной струны 124
 — Пуассона 87
 — струны 68
 — Шредингера атомной цепочки 65
 — — временное 130
 — — гармонического осциллятора 30
 — — двух частиц 111
 — — квантованного шредингеровского волнового поля 99, 106
 — — n частиц 111
 — — проблемы многих электронов в твердом теле 151
 Уравнения Гамильтона 17
 — — в непрерывном пределе (струна) 74
 — — для линейной цепочки 58
 — — Лагранжа 17
 — — в континуальном пределе 73
 — Лондонов 295
 — Максвелла в вакууме 85
 Условие Лоренца 86
 Фейнмановские диаграммы 226
 Ферми-операторы 113
 — — осциллятор смещенный 115, 122
 Фермионный оператор уничтожения в представлении Гейзенберга 138
 — —, уравнение 137
 Фермионы, квантование 104
 Ферромагнетизм, модель Гейзенберга 210
 Фононы 12, 62
 — в континууме 77
 Фотоны 83
 Фрёлиховский гамильтониан взаимодействия между электронами и фононами 219
 Фрёлиховское взаимодействие 299
 Функция Ванье 149
 — Гамильтона 17
 — — вынужденного гармонического осциллятора, классическая 138
 — — линейной цепочки 58
 — — — в непрерывном пределе (струна) 74
 — — система электроны + непрерывное поле 126
 — — скалярного волнового уравнения 84
 — — шредингеровского волнового поля 95

- Функция Гамильтона электромагнитного поля 88
 — Грина 268, 275, 280
 — — многоэлектронной проблемы 280
 — —, определение 276
 — — полярона 286
 — — свободной частицы 277
 — Лагранжа 17
 — — континуума 70
 — — системы электроны + колебания континуума 125
 — — скалярного волнового уравнения 83
 — — шредингеровского волнового поля 96
 — — электромагнитного поля 87
 — распространения 275
 — состояния избыточного электрона 159
 — — невзаимодействующих фермионов 106
 Фурье-интеграл 76
 — образ функции Грина 279
 — преобразование 61
 — ряд непрерывной функции 75
 Хартри приближение 285
 Хартри — Фока метод 150
 — — приближение 286
 Числа заполнения 106
 — — при тепловом равновесии для бозе-частиц 238
 Экситон Ваннье 176
 — Френкеля 182
 —, операторы рождения и уничтожения 187
 —, энергетическая схема 181
 Экситонная молекула 198
 Экситонное вещество 198
 Экситонные капли 199
 Электрическая индукция 221
 Электрическое сопротивление 235
 Электронная дырка 160
 Электрон-электронное взаимодействие в сверхпроводнике 304
 Элементарный магнит 207
 Эрмитово-сопряженный оператор 34
 Эффективная масса 143
 — —, метод 145
 Эффект Мейсснера — Оксенфельда 294
 — Холла аномальный 166