

Введение в квантовую теорию поля

Антоненко Даниил, Побойко Игорь, Степанов Николай

25 февраля 2021 г.

Оглавление

1	Элементы классической теории поля	3
1.1	Классическая механика N степеней свободы	3
1.1.1	Лагранжев формализм	3
1.1.2	Гамильтонов формализм	3
1.1.3	Каноническое квантование	4
1.2	Классическая теория поля	4
1.2.1	Лагранжев формализм	4
1.2.2	Гамильтонов формализм	5
1.2.3	Каноническое квантование	5
1.2.4	Пример: теория Клейна-Гордона	5
1.3	Законы сохранения и симметрии	6
1.3.1	Глобальные симметрии теории и теорема Нётер	6
1.3.2	Пример: комплексная теория Клейна-Гордона	7
1.3.3	Удобный рецепт нахождения тока	7
1.3.4	Тензор энергии-импульса	8
2	Вторичное квантование	9
2.1	Теория Клейна-Гордона	9
2.1.1	Гамильтонов формализм	9
2.1.2	Гамильтониан и квазичастицы	11
2.1.3	Энергия вакуума и ультрафиолетовые расходимости ¹	11
2.2	Многочастичная квантовая механика	12
2.2.1	Тождественность частиц	12
2.2.2	Симметризация волновой функции	12
2.2.3	Построение базиса в Фоковском пространстве \mathcal{F}_N	13
2.2.4	Операторы рождения и уничтожения частиц	13
2.2.5	Замена базиса	14
2.2.6	Вторичное квантование	15
3	Применения аппарата квантовой теории поля	17
3.1	Графен	17
3.1.1	Решёточное преобразование Фурье	17
3.1.2	Модели сильной связи	17
3.1.3	Графен	20
3.2	Фононы	24
3.2.1	Микроскопическая модель	24
3.2.2	Макроскопическая модель	27
3.2.3	Деформационный потенциал и электрон-фононное взаимодействие	28
4	Фейнмановская диаграммная техника	31
4.1	Функции Грина	31
4.1.1	Двухточечные корреляционные функции	31
4.1.2	Свойства причинности и запаздывающий пропагатор	32
4.1.3	Фейнмановский пропагатор	33
4.1.4	Старшие корреляционные функции	33
4.2	Теория возмущений	34

¹Обсуждение этих вопросов можно прочитать, например, в книжке Зи (2009, Глава III.1 «обрезание нашего незнания»)

4.2.1	Теория возмущений	34
4.2.2	Фейнмановские диаграммы для пропагатора теории ϕ^4	36
5	Интеграл по траекториям	39
5.1	... для квантовой теории поля	39
5.1.1	Вычисление средних по основному состоянию	39
5.1.2	Функциональный интеграл для квантовой теории поля	40
5.1.3	О дискретных Гауссовых интегралах	41
5.1.4	Функция Грина свободного поля	42
5.1.5	Теория возмущений	43
5.2	... для многочастичной квантовой механики	43
5.2.1	Когерентные состояния	43
5.2.2	Интеграл по траекториям	45
5.2.3	Большой канонический ансамбль	46
5.3	Слабонеидеальный Бозе-газ	46
5.3.1	Постановка задачи	46
5.3.2	Конденсат	47
5.3.3	Основное состояние	47
6	Элементы флуктуационной теории фазовых переходов II рода	48
6.1	Вступление. Фазовые переходы II рода	48
6.2	Модель Изинга	48
6.2.1	Теоретико-полевое описание	49
6.2.2	Функционал Ландау	50
6.3	Теория Ландау	51
6.3.1	Однородный случай	51
6.3.2	Флуктуации	52
6.3.3	Применимость [TODO]	52
	Список литературы	53

Глава 1

Элементы классической теории поля

Операторный формализм квантовой механики, с которым мы будем работать в дальнейшем в применении к квантовой теории поля, существенно опирается на гамильтоново описание систем. Поэтому в этой лекции мы постараемся напомнить, как строится гамильтониан для классических теорий поля. Проще всего о полях думать как о наборе огромного (в пределе — континуального) набора частиц, так что в каждой точке пространства находится отдельная классическая частица; поэтому начнём мы вообще с классической N -частичной механики.

1.1 Классическая механика N степеней свободы

1.1.1 Лагранжев формализм

В общем случае классическая система из N степеней свободы описывается набором обобщённых координат $\{q_i\}_{i=1}^N$. В рамках лагранжевого формализма, истинная траектория $\{q_i(t)\}_{i=1}^N$ доставляет экстремум $S[q_i(t)]$, называемого **действием**. Действие, как правило, представляет собой интеграл от **функции Лагранжа** $L(q_i, \dot{q}_i, t)$, которая является разностью кинетической и потенциальной энергий:

$$S[q_i(t)] = \int dt \cdot L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t) \quad (1.1)$$

Поиск экстремали функционала сводится к варьированию действия при вариации траектории, и требования обнуления вариационной производной:

$$\delta S[q_i(t)] = \int dt \cdot (L(q_i + \delta q_i, \dot{q}_i + \delta \dot{q}_i, t) - L(q_i, \dot{q}_i, t)) = \int dt \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) = \int dt \underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)}_{\equiv \delta S / \delta q_i(t)} \delta q_i \quad (1.2)$$

Последнее является тем самым определением вариационной производной. Требования зануления первой вариации даёт **уравнения движения** или **уравнения Эйлера-Лагранжа**:

$$\frac{\delta S}{\delta q_i(t)} = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad (1.3)$$

1.1.2 Гамильтонов формализм

Альтернативой лагранжевому формализму является гамильтонов формализм, который обладает над ним рядом преимуществ, которые изучались в курсе теоретической механики. Для построения гамильтонового формализма первым делом необходимо ввести **канонически сопряжённые импульсы** $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$, и выразить все скорости $\dot{q}_i(t)$ через них; а затем произвести преобразование Лежандра функции Лагранжа, перейдя к функции Гамильтона:

$$H(q_i, p_i, t) \equiv \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (1.4)$$

Уравнения движения — уравнения Гамильтона — в таком случае записываются в следующем виде:

$$\begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial q_i} \end{cases} \quad (1.5)$$

Скобки Пуассона

В рамках гамильтонова формализма полезным объектом является **скобка Пуассона**. Она определяется для двух произвольных физических величин $A(q_i, p_i)$ и $B(q_i, p_i)$ согласно соотношению:

$$\{A(q_i, p_i, t), B(q_i, p_i, t)\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \quad (1.6)$$

Среди её свойств можно заметить следующие. Она антикоммутиативна и удовлетворяет тождеству Якоби:

$$\{A, B\} + \{B, A\} \equiv 0, \quad \{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} \equiv 0 \quad (1.7)$$

Кроме того, несложно заметить следующие соотношения:

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (1.8)$$

Наконец, через скобку Пуассона очень компактно записывается уравнение эволюции произвольной физической величины:

$$\frac{dA(q_i(t), p_i(t), t)}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\} \quad (1.9)$$

1.1.3 Каноническое квантование

Наконец, напомним, как осуществляется переход от классической механики к квантовой. В процедуре **канонического квантования** всем наблюдаемым величинам ставятся в соответствие эрмитовы операторы $A \mapsto \hat{A}$, (действующие в гильбертовом пространстве волновых функций) и постулируется следующая связь между коммутационными соотношениями этих операторов и классической скобкой Пуассона¹: $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv i\{A, B\}$

1.2 Классическая теория поля

О квантовой теории поля можно думать следующим образом. Пусть имеется «матрац»: система из N частиц, каждая из которых находится в реальном пространстве и расположена в какой-то точке \mathbf{x} . В непрерывном пределе $N \rightarrow \infty$ эта система частиц описывается полем $\phi(\mathbf{x})$ (тем самым, индекс i , нумеровавший частицы, превращается в непрерывный индекс \mathbf{x}). Все функции N переменных (вроде функции Лагранжа) превращаются в функционалы соответствующих полей. В таком случае, общие правила взятия такого непрерывного предела заключаются в следующем:

$$L(q_i) \mapsto L[\phi(\mathbf{x})], \quad \sum_i \mapsto \int d\mathbf{x}, \quad \delta_{ij} \mapsto \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \frac{\partial}{\partial q_i} \mapsto \frac{\delta}{\delta\phi(\mathbf{x})} \quad (1.10)$$

1.2.1 Лагранжев формализм

Раньше мы имели дело с функцией Лагранжа, теперь же функция Лагранжа сама превращается в функционал. Нас будут интересовать только локальные функции Лагранжа — то есть те, которые представимы в виде интеграла по пространству от **плотности лагранжиана**, который, в свою очередь, является уже обычной функцией полей (и, возможно, их производных)²:

$$S[\phi(\mathbf{x}, t)] = \int dt L[\phi(\mathbf{x}, t), \partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t)], \quad L[\phi(\mathbf{x}, t), \partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t)] = \int d\mathbf{x} \mathcal{L}(\phi(\mathbf{x}, t), \partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t)) \quad (1.11)$$

(индекс μ пробегает как временную, так и пространственные координаты $\mu \in \{t, x, y, z\}$). Такое действие варьируется полностью аналогично N -частичной механике:

$$\frac{\delta S}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} = \frac{\delta L}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} - \partial_\mu \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t))} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} = 0 \quad (1.12)$$

(по повторяющимся индексам производится суммирование; кроме того, поскольку в дальнейшем мы будем иметь дело с релятивистскими теориями поля, подразумевается метрика Минковского $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$).

¹Конечно, тут имеется проблема в построении квантовых аналогов выражений типа xp : из-за их некоммутации, соответствующий оператор $\hat{x}\hat{p}$, вообще говоря, будет неэрмитов, из-за чего требуется их дополнительно симметризовать. Но нам будет достаточно случаев, где этих проблем не возникает.

²Не все теории поля представимы в таком виде. В различных приложениях — например, в гидродинамике — порой приходится сталкиваться и с нелокальными теориями поля. Впрочем, с точки зрения релятивизма, такие теории нарушают лоренц-инвариантность и причинность, поэтому большого смысла они не имеют.

1.2.2 Гамильтонов формализм

Следуя общей схеме, для построения гамильтонового описания поля необходимо ввести канонически сопряжённый импульс (который тоже представляет собой поле):

$$\pi(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta(\partial_t \phi(\mathbf{x}))} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \phi)}, \quad (1.13)$$

и после чего произвести преобразование Лежандра, переходя к функционалу Гамильтона³:

$$H[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})] = \int d\mathbf{x} \pi(\mathbf{x}) \partial_t \phi(\mathbf{x}) - L[\phi(\mathbf{x}), \partial_\mu \phi(\mathbf{x})] \quad (1.14)$$

Функционал Гамильтона для локальных теорий поля тоже представляет собой интеграл по пространству от **плотности гамильтониана** (имеющей смысл плотности энергии), представляющей собой обычную функцию:

$$H[\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}, t)] = \int d\mathbf{x} \mathcal{H}(\phi(\mathbf{x}), \nabla \phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})), \quad \mathcal{H} = \pi \partial_t \phi - \mathcal{L} \quad (1.15)$$

Наконец, уравнения движения — уравнения Гамильтона — записываются следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{d\phi(\mathbf{x}, t)}{dt} = \frac{\delta H}{\delta \pi} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} \\ \frac{d\pi(\mathbf{x}, t)}{dt} = -\frac{\delta H}{\delta \phi} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} + \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla \phi)} \end{cases} \quad (1.16)$$

Скобки Пуассона

Наконец, физические величины тоже вводятся как функционалы полей, а скобка Пуассона определяется для них следующим образом:

$$\{A[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})], B[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})]\} = \int d\mathbf{x} \left[\frac{\delta A}{\delta \phi(\mathbf{x})} \frac{\delta B}{\delta \pi(\mathbf{x})} - \frac{\delta A}{\delta \pi(\mathbf{x})} \frac{\delta B}{\delta \phi(\mathbf{x})} \right] \quad (1.17)$$

Она удовлетворяет всем тем же свойствам, что и скобка Пуассона для классической многочастичной системы; в частности, верны следующие соотношения:

$$\{\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y})\} = 0, \quad \{\pi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})\} = 0, \quad \{\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.18)$$

1.2.3 Каноническое квантование

Каноническое также производится аналогично случаю механики, поля $\phi(\mathbf{x})$ и $\pi(\mathbf{x})$ становятся операторами: $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ и $\hat{\pi}(\mathbf{x})$. Во избежание недоразумений, подчеркнём, что в отличие от квантовой механики, \mathbf{x} не становится оператором. Как правило, никто не работает с квантовой теорией поля на языке волновых функций, но нужно понимать, что она представляла бы собой волновой функционал $\Phi[\phi(\mathbf{x})]$.

1.2.4 Пример: теория Клейна-Гордона

Давайте проведём всю эту процедуру для одной из наиболее простых релятивистских теорий поля — теории Клейна-Гордона. Эта теория описывает скалярное поле $\phi(\mathbf{x})$ со следующим действием:

$$S[\phi] = \frac{1}{2} \int d^4x [(\partial_\mu \phi)^2 - m^2 \phi^2] = \frac{1}{2} \int d^4x [(\partial_t \phi)^2 - (\nabla \phi)^2 - m^2 \phi^2]. \quad (1.19)$$

(у теории имеется внешний параметр m — «масса»; скорость света c положена равной единице). Следуя приведённым выше рассуждениям, уравнения движения имеют вид:

$$\frac{\delta S}{\delta \phi} = -(\partial^2 + m^2)\phi = 0, \quad \partial^2 = \partial_t^2 - \nabla^2. \quad (1.20)$$

Канонически сопряжённый к ϕ импульс даётся выражением $\pi(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta(\partial_t \phi(\mathbf{x}))} = \partial_t \phi(\mathbf{x})$; поэтому гамильтониан имеет вид:

³Стоит обратить внимание, что даже если исходная теория поля была релятивистски инвариантной, то гамильтоново её описание уже таковым не является, явно выделяя роль временной оси; что довольно очевидно, ведь функция Гамильтона — это энергия, и она не является релятивистски инвариантной величиной. Тем не менее, это ничему не противоречит

$$H[\phi, \pi] = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} [\pi^2 + (\nabla\phi)^2 + m^2\phi^2]. \quad (1.21)$$

и уравнения Гамильтона записываются следующим образом:

$$\begin{cases} \partial_t\phi &= \pi \\ \partial_t\pi &= -m^2\phi + \nabla^2\phi \end{cases} \quad (1.22)$$

1.3 Законы сохранения и симметрии

В механике многих частиц законы сохранения энергии формулировались в виде постоянства во времени величин, определённых для всей системы (энергия, импульс, и т. д.). В теории поля законы сохранения обычно рассматривают в виде уравнений непрерывности для плотности некоторой величины $q(x, t)$ и плотности её потока $\mathbf{j}(x, t)$:

$$\partial_t q + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (1.23)$$

Это уравнение описывает не только сохранение интегральной величины $Q(t) = \int d\mathbf{x} q(\mathbf{x}, t)$ (которую иногда называют **зарядом** в обобщённом смысле), но и накладывают ограничения на динамику плотности заряда q . Так, в интегральной форме уравнение (1.23) записывается в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V q d\mathbf{x} = - \int_{\partial V} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S}, \quad (1.24)$$

и связывает изменение интеграла от q по некоторой области V с полным потоком \mathbf{j} через границу этой области ∂V . Для релятивистских теорий уравнение (1.23) можно записать в инвариантной форме:

$$\boxed{\partial_\mu j^\mu = 0}, \quad (1.25)$$

где был введён 4-вектор сохраняющегося тока $j^\mu = (q, \mathbf{j})$. Самым известным примером служит 4-вектор электрического тока. Ниже мы познакомимся и с другими примерами.

1.3.1 Глобальные симметрии теории и теорема Нётер

Так же как и в механике частиц, наличие сохраняющихся токов связано с наличием симметрий в рассматриваемой теории. Рассмотрим здесь случайных **глобальных** симметрий, которые параметризуются конечным числом параметров⁴. Пусть имеется некоторое инфинитезимальное преобразование полей⁵ ϕ :

$$\phi \rightarrow \phi + \alpha \Delta\phi, \quad (1.26)$$

где α — малый параметр, а $\Delta\phi$ — некоторая функция полей и, возможно, их производных. Если это преобразование оставляет инвариантным лагранжиан, то такое преобразование является симметрией теории. Заметим однако, что если лагранжиан меняется на полную производную, то действие меняется на константу (равную нулю для периодических граничных условий), а уравнения движения остаются прежними. Такой случай тоже является симметрией системы. Поэтому будем считать, что лагранжиан меняется так:

$$\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} + \alpha \partial_\mu J^\mu. \quad (1.27)$$

С другой стороны, можно выразить изменение лагранжиана через изменение полей:

$$\Delta\mathcal{L} = \alpha \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi} \Delta\phi + \alpha \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} \partial_\mu\Delta\phi = \alpha \left[\left(\partial_\mu \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} \right) \Delta\phi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} \partial_\mu\Delta\phi \right] = \alpha \partial_\mu \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)} \Delta\phi \right],$$

где во второй строчке мы воспользовались уравнениями движения для преобразования первого члена. Сравнивая результат с (1.27), получим

⁴Термин «глобальная симметрия» используется в противовес понятию *калибровочной* симметрии, то есть симметрии, параметризуемой произвольной функцией времени и координат $f(x^\mu)$. Наличие калибровочных симметрий имеет больше последствий и требует отдельного рассмотрения. С физической точки зрения наличие калибровочной симметрии означает некоторую избыточность полевых функций, описывающих физическую реальность, так например, разные конфигурации вектор-потенциала A^μ могут описывать одни и те же электрические и магнитные поля в электродинамике. При этом попытки сформулировать, скажем, квантовую теорию непосредственно на языке физических полей \mathbf{E} и \mathbf{B} не увенчались особым успехом.

⁵Предполагается, что если полей несколько, то все они включены в вектор ϕ .

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \Delta \phi \right] = \partial_\mu J^\mu, \quad (1.28)$$

что означает сохранение тока

$$j^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \Delta \phi - J^\mu. \quad (1.29)$$

Это утверждение носит название теоремы Нётер, так же, как и в механике частиц. Если полей несколько, то в выражении для j^μ должна стоять сумма по всем полям.

1.3.2 Пример: комплексная теория Клейна-Гордона

Рассмотрим теорию с лагранжианом

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \bar{\phi} \partial^\mu \phi - m^2 \bar{\phi} \phi. \quad (1.30)$$

Для начала получим уравнения движения для этой теории. Поля ϕ и $\bar{\phi}$ связаны друг с другом, поэтому прямолинейное решение предполагает переход к полям $\text{Re}\phi$ и $\text{Im}\phi$. Однако стандартный и гораздо более удобный способ состоит в рассмотрении полей ϕ и $\bar{\phi}$ как независимых. Тогда легко получить уравнения движения

$$(\partial^2 + m^2) \phi = 0, \quad (1.31)$$

$$(\partial^2 + m^2) \bar{\phi} = 0. \quad (1.32)$$

Законность этой процедуры обосновывается тем, что, если начальные условия таковы, что ϕ и $\bar{\phi}$ комплексно сопряжены, то уравнения движения (1.31-1.32) сохраняют это свойство при временной динамике и «связь» (которая и заключается в том, что ϕ и $\bar{\phi}$ сопряжены) не влияет на динамику.

Несложно также ввести канонически сопряжённые поля импульсы

$$\pi = \partial_t \bar{\phi}, \quad \bar{\pi} = \partial_t \phi \quad (1.33)$$

и найти гамильтониан

$$\mathcal{H} = \pi \partial_t \phi + \bar{\pi}^* \partial_t \phi^* - \mathcal{L} = |\pi|^2 + |\nabla \phi|^2 + m^2 |\phi|^2. \quad (1.34)$$

Видно, что теория инвариантна относительно преобразования

$$\phi \rightarrow \phi e^{i\theta} = \phi + i\theta\phi + \dots \quad (1.35)$$

$$\bar{\phi} \rightarrow \bar{\phi} e^{-i\theta} = \bar{\phi} - i\theta\bar{\phi} + \dots \quad (1.36)$$

Тогда в наших обозначениях $\Delta \phi = i\phi$, $J^\mu = 0$ и (опять-таки, рассматривая поля ϕ и $\bar{\phi}$, как независимые) найдём сохраняющийся ток

$$j^\mu = i\phi \partial^\mu \bar{\phi} - i\bar{\phi} \partial^\mu \phi. \quad (1.37)$$

1.3.3 Удобный рецепт нахождения тока

Как правило, для нахождения тока удобнее не применять теорему Нётер непосредственно, а использовать следующий приём. Сделаем вместо глобального калибровочное преобразование (которое, разумеется, не оставляет действие инвариантным). Для случая комплексного Клейна-Гордона оно выглядит так:

$$\phi \rightarrow \phi e^{i\theta(x^\mu)} = \phi + i\phi\theta(x^\mu) + \dots \quad (1.38)$$

Тогда действие преобразуется так:

$$S \rightarrow S + \int d^4x \partial_\mu \theta (i\phi \partial^\mu \bar{\phi} - i\bar{\phi} \partial^\mu \phi) = S - \int d^4x \cdot \theta \partial_\mu (i\phi \partial^\mu \bar{\phi} - i\bar{\phi} \partial^\mu \phi).$$

Выражение под знаком ∂_μ и есть сохраняющийся ток. Попробуйте доказать это строго самостоятельно.

1.3.4 Тензор энергии-импульса

Рассмотрим симметрию относительно трансляций на 4-вектор a^ν (в действительности, это 4 различных симметрии, и соответственно они дадут 4 различных сохраняющихся тока, которые мы объединим в тензор второго ранга):

$$\phi(x^\nu) \rightarrow \phi(x^\nu + a^\nu) = \phi(x^\nu) + a^\nu \partial_\nu \phi + \dots \quad (1.39)$$

Такая симметрия тривиально изменяет Лагранжиан:

$$\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} + a^\mu \partial_\mu \mathcal{L} = \mathcal{L} + \partial_\mu (\eta^{\mu\nu} \mathcal{L}) a_\nu \Rightarrow J^{\mu\nu} = \eta^{\mu\nu} \mathcal{L} \quad (1.40)$$

Применяя теорему Нётер, получим сохранение токов, которые обозначим буквой T :

$$\boxed{T_{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \partial_\nu \phi - \eta_{\mu\nu} \mathcal{L}, \quad \partial_\mu T^{\mu\nu} = 0.} \quad (1.41)$$

Разумеется, $T_{\mu\nu}$ имеет интерпретацию тензора энергии-импульса. T^{00} — это плотность энергии, T^{0i} — плотность потока энергии, T^{i0} — плотность импульса, T^{ij} — тензор плотности потока импульса или, другими словами, тензор напряжений. $(0, 0)$ -компонента уравнения (1.41) представляет собой преобразование Лежандра, превращающее лагранжиан в гамильтониан.

Метрический тензор энергии-импульса

Другой способ ввести тензор энергии-импульса — это рассмотреть действие на фоне произвольной метрики $g_{\mu\nu}$ близкой к плоской. Такое действие получается введением меры интегрирования $\sqrt{-g}$, $g := \det g_{\mu\nu}$ и заменой во всех выражениях метрики Минковского на новую метрику:

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} \mathcal{L} (\eta_{\mu\nu} \rightarrow g_{\mu\nu}). \quad (1.42)$$

Например, теория Клейна-Гордона будет иметь действие

$$S = \frac{1}{2} \int d^4x \sqrt{-g} [g^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi - m^2 \phi^2] \quad (1.43)$$

Метрический тензор энергии-импульса определяется, как

$$\boxed{\tilde{T}^{\mu\nu} = \frac{\partial (\sqrt{-g} \mathcal{L})}{\partial g_{\mu\nu}}.} \quad (1.44)$$

Можно показать в общем виде, что он сохраняется. Вообще говоря, полученные два тензора различаются; видно, что первый, в отличие от второго, не всегда является симметричным⁶. Заметим, однако, что добавка к нему произвольного слагаемого $\partial_\lambda K^{\mu\lambda\nu}$, с антисимметричным по первым двум индексам тензором $K^{\mu\lambda\nu} = -K^{\lambda\mu\nu}$, оставляет свойство сохранения (1.41) выполненным. Это можно использовать для того, чтобы сделать $T_{\mu\nu}$ симметричным.

⁶Для общей теории относительности важна симметричность тензора энергии-импульса, который входит в уравнение Эйнштейна. Именно поэтому в ОТО именно второе выражение берётся за определение.

Глава 2

Вторичное квантование

2.1 Теория Клейна-Гордона

Обозначения

Тут и далее, когда мы будем иметь дело с релятивистскими теориями поля (а теория Клейна-Гордона к таковым относится), мы условимся на следующих обозначениях. Жирным шрифтом — \mathbf{x} — мы будем обозначать трёхмерные вектора; так что выражение $\mathbf{p}\mathbf{x}$ обозначает стандартное скалярное произведение. Обычным шрифтом (там где это не вызовет путаницы) мы будем обозначать четыре-вектора $x = (t, \mathbf{x})$, и выражение $px = p^\mu x^\mu = Et - \mathbf{p}\mathbf{x}$ (подразумевается метрика Минковского $\eta^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$; и мы не будем различать ковариантные p^μ и контравариантные p_μ вектора). Наконец, мы, как всегда, работаем в *god-given* системе единиц $\hbar = c = 1$.

2.1.1 Гамильтонов формализм

Ранее мы получили выражение для квантовой теории поля Клейна-Гордона:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} (\hat{\pi}^2(\mathbf{x}) + (\nabla \hat{\phi}(\mathbf{x}))^2 + m^2 \hat{\phi}^2(\mathbf{x})), \quad [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\pi}(\mathbf{y})] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.1)$$

Давайте попробуем найти спектр этого Гамильтониана, а заодно поучимся работать с квантовой теорией поля. Причина, по которой это оказывается возможным сделать достаточно просто, заключается в том, что гамильтониан квадратичен по полям, и, как следствие, уравнения движения (в том числе и операторные) — линейны. Для диагонализации квантового гармонического осциллятора, мы переходили к операторам, которые диагонализуют классические уравнения движения; предлагается поступить в данной задаче точно так же.

Циклические переменные и лестничные операторы

Как было обсуждено на первой лекции, полевые операторы удовлетворяют классическим уравнениям движения; в чём, в принципе, можно убедиться и непосредственно:

$$\frac{d\hat{\phi}(\mathbf{x})}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\phi}(\mathbf{x})] = \frac{i}{2} \int d\mathbf{y} [\hat{\pi}^2(\mathbf{y}), \hat{\phi}(\mathbf{x})] = \hat{\pi}(\mathbf{x}) \quad (2.2)$$

$$\frac{d\hat{\pi}(\mathbf{x})}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\pi}(\mathbf{x})] = \frac{i}{2} \int d\mathbf{y} [(\nabla \hat{\phi}(\mathbf{y}))^2 + m^2 (\hat{\phi}(\mathbf{y}))^2, \hat{\pi}(\mathbf{x})] = \nabla^2 \hat{\phi}(\mathbf{x}) - m^2 \hat{\phi}(\mathbf{x}) \quad (2.3)$$

Поскольку система трансляционно инвариантна, то первый шаг к диагонализации такого гамильтониана — это преобразование Фурье. Для удобства и методологической простоты, мы поместим систему в трёхмерный ящик размера $V = L_x \times L_y \times L_z$ и на классическое поле $\phi(\mathbf{x})$ наложим периодические граничные условия; тогда интересующий нас Фурье-базис представляет собой набор плоских волн $\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}$, а допустимые импульсы параметризуются тройкой целых чисел согласно $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) \equiv (\frac{2\pi}{L_x} n_x, \frac{2\pi}{L_y} n_y, \frac{2\pi}{L_z} n_z)$. В таком случае, разложение Фурье запишется следующим образом¹:

¹Полевые операторы можно точно так же раскладывать в ряды и интегралы Фурье, как и обычные функции. Понимать под этим можно следующее: матричные элементы операторов по произвольным волновым функциям $f(\mathbf{x}) = \langle \psi_1 | \hat{\phi}(\mathbf{x}) | \psi_2 \rangle$ являются самыми обыкновенными функциями, и эти функции уже можно раскладывать в ряд Фурье.

В результате, *коэффициенты* такого разложения будут, в свою очередь, являться операторами (матричные элементы которых определены как соответствующие коэффициенты разложения в ряд Фурье матричных элементов исходных операторов). Но в целом, с такого рода разложениями можно работать весьма свободно.

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{\phi}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}, \quad \hat{\phi}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d\mathbf{x} \hat{\phi}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} \quad (2.4)$$

«Коэффициенты» Фурье не являются произвольными — поскольку исходно мы имели дело с вещественной теорией поля, то

$$\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) = \hat{\phi}(\mathbf{x}) \Rightarrow \hat{\phi}_{\mathbf{p}}^\dagger = \hat{\phi}_{-\mathbf{p}}, \quad (2.5)$$

об этом ограничении стоит помнить. Всё вышесказанное, разумеется, относится и к $\hat{\pi}(\mathbf{x})$. Выпишем коммутационные соотношения:

$$[\hat{\phi}_{\mathbf{p}}, \hat{\pi}_{\mathbf{p}'}] = \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x} - i\mathbf{p}'\mathbf{x}'} [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\pi}(\mathbf{x}')] = \frac{i}{V} \int d\mathbf{x} e^{-i(\mathbf{p}+\mathbf{p}')\mathbf{x}} = i\delta_{\mathbf{p}, -\mathbf{p}'} \quad (2.6)$$

Гамильтониан в этих переменных запишется следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \int d\mathbf{x} \left[\hat{\pi}_{\mathbf{p}} \hat{\pi}_{\mathbf{p}'} + (i\mathbf{p} \cdot i\mathbf{p}' + m^2) \hat{\phi}_{\mathbf{p}} \hat{\phi}_{\mathbf{p}'} \right] e^{i(\mathbf{p}+\mathbf{p}')\mathbf{x}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left[\hat{\pi}_{\mathbf{p}} \hat{\pi}_{-\mathbf{p}} + E_{\mathbf{p}}^2 \hat{\phi}_{\mathbf{p}} \hat{\phi}_{-\mathbf{p}} \right], \quad E_{\mathbf{p}}^2 \equiv \mathbf{p}^2 + m^2. \quad (2.7)$$

а уравнения движения примут следующий вид:

$$\frac{d\hat{\phi}_{\mathbf{p}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\phi}_{\mathbf{p}}] = \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[\hat{\pi}_{\mathbf{q}} \hat{\pi}_{-\mathbf{q}}, \hat{\phi}_{\mathbf{p}} \right] = \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left(\hat{\pi}_{\mathbf{q}} \left[\hat{\pi}_{-\mathbf{q}}, \hat{\phi}_{\mathbf{p}} \right] + \left[\hat{\pi}_{\mathbf{q}}, \hat{\phi}_{\mathbf{p}} \right] \hat{\pi}_{-\mathbf{q}} \right) = \hat{\pi}_{\mathbf{p}} \quad (2.8)$$

$$\frac{d\hat{\pi}_{\mathbf{p}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{\pi}_{\mathbf{p}}] = \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}}^2 \left[\hat{\phi}_{\mathbf{q}} \hat{\phi}_{-\mathbf{q}}, \hat{\pi}_{\mathbf{p}} \right] = \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}}^2 \left(\hat{\phi}_{\mathbf{q}} \left[\hat{\phi}_{-\mathbf{q}}, \hat{\pi}_{\mathbf{p}} \right] + \left[\hat{\phi}_{\mathbf{q}}, \hat{\pi}_{\mathbf{p}} \right] \hat{\phi}_{-\mathbf{q}} \right) = -E_{\mathbf{p}}^2 \hat{\phi}_{\mathbf{p}} \quad (2.9)$$

Это — обычные уравнения гармонического осциллятора, и диагонализуются циклическими переменными² $\hat{A}_{\mathbf{p}} = \hat{\phi}_{\mathbf{p}} + \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}_{\mathbf{p}}$:

$$\frac{d\hat{A}_{\mathbf{p}}}{dt} = \hat{\pi}_{\mathbf{p}} - iE_{\mathbf{p}} \hat{\phi}_{\mathbf{p}} = -iE_{\mathbf{p}} \hat{A}_{\mathbf{p}} \Rightarrow \hat{A}_{\mathbf{p}}(t) = \hat{A}_{\mathbf{p}} e^{-iE_{\mathbf{p}}t} \quad (2.10)$$

Определим коммутационные соотношения построенных операторов:

$$[\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{A}_{\mathbf{p}'}] = \left[\hat{\phi}_{\mathbf{p}} + \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}_{\mathbf{p}}, \hat{\phi}_{\mathbf{p}'} + \frac{i}{E_{\mathbf{p}'}} \hat{\pi}_{\mathbf{p}'} \right] = \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} [\hat{\pi}_{\mathbf{p}}, \hat{\phi}_{\mathbf{p}'}] + \frac{i}{E_{\mathbf{p}'}} [\hat{\phi}_{\mathbf{p}}, \hat{\pi}_{\mathbf{p}'}] = 0 \quad (2.11)$$

$$[\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{A}_{\mathbf{p}'}^\dagger] = \left[\hat{\phi}_{\mathbf{p}} + \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}_{\mathbf{p}}, \hat{\phi}_{-\mathbf{p}'} - \frac{i}{E_{\mathbf{p}'}} \hat{\pi}_{-\mathbf{p}'} \right] = \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} [\hat{\pi}_{\mathbf{p}}, \hat{\phi}_{-\mathbf{p}'}] - \frac{i}{E_{\mathbf{p}'}} [\hat{\phi}_{\mathbf{p}}, \hat{\pi}_{-\mathbf{p}'}] = \frac{2}{E_{\mathbf{p}}} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \quad (2.12)$$

Отметим, что при произвольном импульсе \mathbf{p} , среди четырёх операторов $\{\hat{\phi}_{\mathbf{p}}, \hat{\phi}_{-\mathbf{p}}, \hat{\pi}_{\mathbf{p}}, \hat{\pi}_{-\mathbf{p}}\}$ имеются лишь две независимые (комплексные) степени свободы; циклические переменные $\hat{A}_{\mathbf{p}}$ и $\hat{A}_{-\mathbf{p}}$ также образуют две линейно-независимые комплексные степени свободы. Таким образом, мы по пути ничего не потеряли, такое преобразование обратимо. Наконец, видно, что последние два соотношения с точностью до константы реализуют лестничную осцилляторную алгебру. В результате мы можем ввести лестничные операторы в следующем виде:

$$\hat{a}_{\mathbf{p}} = \sqrt{\frac{E_{\mathbf{p}}}{2}} \left(\hat{\phi}_{\mathbf{p}} + \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}_{\mathbf{p}} \right), \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger = \sqrt{\frac{E_{\mathbf{p}}}{2}} \left(\hat{\phi}_{-\mathbf{p}} - \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}_{-\mathbf{p}} \right), \quad \hat{a}_{-\mathbf{p}} = \sqrt{\frac{E_{\mathbf{p}}}{2}} \left(\hat{\phi}_{-\mathbf{p}} + \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}_{-\mathbf{p}} \right), \quad \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger = \sqrt{\frac{E_{\mathbf{p}}}{2}} \left(\hat{\phi}_{\mathbf{p}} - \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}_{\mathbf{p}} \right) \quad (2.13)$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}] = 0, \quad [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}, \quad \hat{a}_{\mathbf{p}}(t) = \hat{a}_{\mathbf{p}} e^{-iE_{\mathbf{p}}t} \quad (2.14)$$

Эти соотношения можно обратить, выразив полевые операторы через лестничные:

$$\hat{\phi}_{\mathbf{p}} = \frac{\hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}}, \quad \hat{\pi}_{\mathbf{p}} = (-i) \sqrt{\frac{E_{\mathbf{p}}}{2}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} - \hat{a}_{-\mathbf{p}}^\dagger), \quad (2.15)$$

и, восстановив зависимость от времени, мы получаем (тут уже используются четырёхмерные обозначения $p^\mu = (E_{\mathbf{p}}, \mathbf{p})$ и $x^\mu = (t, \mathbf{x})$, поэтому $px = E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p}\mathbf{x}$):

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx}) \\ \hat{\pi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} (-i) \sqrt{\frac{E_{\mathbf{p}}}{2}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{-ipx} - \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx}) \end{array} \right. \quad (2.16)$$

²Выбор циклических переменных не единственный — разумеется, они определены с точностью до произвольного комплексного множителя. Тут мы выбрали фазу этого множителя так, чтобы обозначения совпали с принятыми в литературе; а модуль его мы определим чуть ниже

2.1.2 Гамильтониан и квазичастицы

Теперь единственное, что нам осталось — выразить гамильтониан через лестничные операторы. Подставляя (2.15) в (2.7), мы немедленно приходим к выводу, что гамильтониан действительно представляет собой набор независимых гармонических осцилляторов:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left(\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.17)$$

по одному осциллятору на каждое допустимое *квантовое состояние* (состояния тут нумеруются импульсом \mathbf{p}). В этом представлении волновые функции параметризуются набором *чисел заполнения* этих состояний $n_{\mathbf{p}} = 0, 1, 2, \dots$ (эти числа заполнения являются собственными числами оператора $\hat{n}_{\mathbf{p}} = \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}}$): $|\psi\rangle = |n_{\mathbf{p}_1}, n_{\mathbf{p}_2}, \dots\rangle$.

Такое представление собственных состояний гамильтониана допускает следующую трактовку. Величины $n_{\mathbf{p}}$ обозначают количество *квазичастиц* в состоянии с импульсом \mathbf{p} . Поскольку такое число может быть произвольным неотрицательным, то мы явно имеем дело с *бозонами*. Операторы $\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ *рождают* частицу в состоянии с импульсом \mathbf{p} , а $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ — уничтожают. Поскольку в этом представлении энергия волновой функции равна $E = \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}}$ (за вычетом постоянного множителя, который мы пока опустим), то каждая такая квазичастица несёт энергию $E_{\mathbf{p}}$.

Основное состояние такого гамильтониана — состояние с нулевыми числами заполнения, то есть состояние без частиц — носит название *вакуума*, и обозначается как $|0\rangle$.

2.1.3 Энергия вакуума и ультрафиолетовые расходимости³

Основное состояние — вакуум — обладает конечной энергией, которая складывается из энергии «нулевых колебаний»:

$$E_0 = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2} E_{\mathbf{p}} \quad (2.18)$$

«Термодинамический предел» $V \rightarrow \infty$ (который, конечно же, тут везде подразумевался) строится стандартным образом путём тривиальной замены суммирований по импульсам на интегралы: $\sum_{\mathbf{p}} \mapsto \int \frac{V d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3}$. Можно заметить, что в этом пределе энергия вакуума бесконечна, поскольку пропорциональна (бесконечно большому) объёму системы. Само по себе это не должно удивлять: ведь энергия является экстенсивной физической величиной, и она *должна быть* пропорциональна объёму.

Плотность энергии вакуума $\epsilon = \frac{E}{V} = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} E_{\mathbf{p}}$ уже является хорошо определённой величиной в термодинамическом пределе. Однако, к сожалению и этот интеграл расходится на больших импульсах как $\sim p^4$. Такие расходимости — расходимости на больших импульсах — называют *ультрафиолетовыми расходимостями*, и они являются источником головной боли людей, занимающихся квантовыми теориями поля.

Что же означает такая расходимость? Тут есть несколько подходов и ответов на этот вопрос. Во-первых, можно отметить, что плотность энергии вакуума не является *наблюдаемой физической величиной*. Измерима лишь разница энергий, и таким образом эту бесконечную константу можно просто игнорировать, покуда она неизмерима. Во-вторых — любопытный читатель может заметить, что тензор энергии-импульса вакуума всё-таки входит в уравнения общей теории относительности Эйнштейна и определяет величину космологической постоянной Λ , и тем самым всё-таки наблюдается. Совмещение квантовой теории поля и гравитации по сей день является нерешённой задачей, поэтому ОТО мы заниматься не будем, а на это замечание ответим гораздо более важным утверждением. Большие импульсы и энергии по дуальности соответствуют малым расстояниям и масштабам времени. *На самом деле* никто не знает, как там устроена природа, каким уравнениям она подчиняется (теория струн?). Мы знаем лишь, что в допустимых экспериментально пределах эта теория работает достаточно хорошо; но даже уже мы знаем, что не всё так просто. Частицы материи состоят из ещё более мелких частиц — лептонов и кварков, а бозоны — переносчики взаимодействия подчиняются чуть более сложным теориям, чем теория Клейна-Гордона. Так что на самом деле, всякая теория поля имеет смысл лишь как некоторое *низкоэнергетическое эффективное рассмотрение*, имеющая свои границы применимости. В частности, наличие ультрафиолетовых расходимостей лишь доказывает, что на больших энергиях наша теория попросту *неприменима*, и её выводами можно пользоваться только для достаточно малых импульсов. В теорию необходимо вводить *обрезку, регуляризацию* — например, ограничивать допустимые импульсы некоторым большим, но конечным (и, увы, неизвестным) импульсом $|\mathbf{p}| < \Lambda$.

Таким образом, ультрафиолетовые расходимости в некоторых физических величинах означают лишь то, что данные величины *невозможно вычислить* в рамках теории. Они зависят от поведения системы там, где теория уже не работает (зависят от обрезки Λ). Может показаться странным — а зачем тогда вообще такая теория нужна? Прелесть в том, что в *хороших* теориях (например, квантовая электродинамика) количество величин, которые невозможно вычислить в рамках теории, оказывается конечным. Если взять значения для них, скажем, из эксперимента — то с ними можно уже связать

³Обсуждение этих вопросов можно прочитать, например, в книжке Зи (2009, Глава III.1 «обрезание нашего незнания»)

другие, менее тривиальные физические величины; тем самым, такие теории обладают всё-таки *предсказательной силой* и являются осмысленными.

Иначе проявляют себя *инфракрасные расходимости*, или расходимости в физических величинах при $|\mathbf{p}| \rightarrow 0$. Такие расходимости физичны, поскольку они находятся в пределах границы применимости теории, и обычно они являются указанием на *нечто интересное*, происходящее в данной системе. С такими расходимостями приходится разбираться индивидуально.

2.2 Многочастичная квантовая механика

Рассмотрим типичную задачу многочастичной квантовой механики. Пусть имеются N частиц, координаты которых $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$. Волновая функция, описывающая такую систему, является функцией N координат, и записывается как $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$. Если, к примеру, при этом частицы находятся в некотором потенциале $U(\mathbf{x})$, и взаимодействуют парным образом согласно потенциалу $V(\mathbf{x})$, то Гамильтониан такой системы записывается следующим образом:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_n^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{x}}_n) \right) + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(\hat{\mathbf{x}}_n - \hat{\mathbf{x}}_m). \quad (2.19)$$

На этой лекции мы построим удобный аппарат, позволяющий работать с подобными системами тождественных частиц — аппарат, базирующийся на идеях квантовой теории поля. Построение базируется на книге Altland и Simons (2010, chapter 2 «Second quantization»), а также Ландау и Лифшиц (2002, глава 9 «Тождественные частицы»).

2.2.1 Тождественность частиц

Квантовая механика постулирует, что одинаковые частицы неразличимы. Это условие накладывает определённые ограничения на все возможные волновые функции: если частицы — *фермионы*, то полная волновая функция $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ должна быть антисимметрична по отношению перестановке пары произвольных координат; если же частицы — *бозоны*, то симметрична. Это условие можно записать следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{c} \Psi^{(F)} \\ \Psi^{(B)} \end{array} \right\} (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \equiv \left\{ \begin{array}{c} \text{sign} \sigma \\ 1 \end{array} \right\} \cdot \Psi(\mathbf{x}_{\sigma_1}, \mathbf{x}_{\sigma_2}, \dots, \mathbf{x}_{\sigma_N}), \quad \forall \sigma \in S_N \quad (2.20)$$

(σ — произвольная перестановка N чисел; верхний вариант соответствует фермионам, а нижний — бозонам). Пространство всех волновых функций N частиц, обладающих нужными свойствами симметрии, мы будем обозначать $\mathcal{F}_N^{(B/F)}$, и называть **Фоковским пространством** N частиц (B для бозонов и F для фермионов; дальше верхний индекс мы будем опускать). Пространство \mathcal{F}_1 очевидным образом совпадает для бозонов и фермионов, и именно с ним мы имеем дело когда занимаемся стандартной квантовой механикой.

2.2.2 Симметризация волновой функции

Что же мы имеем в виду, когда говорим, что первая частица находится в состоянии $\psi_1(\mathbf{x})$, вторая — $\psi_2(\mathbf{x})$, и так далее (это могут быть, например, атомные орбитали, или плоские волны)? Если бы мы забыли о том, что частицы тождественны, то это бы означало, что полная волновая функция является просто произведением одночастичных волновых функций: $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi_1(\mathbf{x}_1) \dots \psi_N(\mathbf{x}_N)$. Условие тождественности частиц в действительности означает, что это определение необходимо модифицировать, а именно — симметризовать. Симметризация происходит достаточно прямолинейно⁴:

$$\left\{ \begin{array}{c} \Psi^{(F)} \\ \Psi^{(B)} \end{array} \right\} (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_{\sigma \in S_N} \left\{ \begin{array}{c} \text{sign} \sigma \\ 1 \end{array} \right\} \psi_{\sigma_1}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{\sigma_N}(\mathbf{x}_N) \quad (2.21)$$

Для фермионов такой объект носит название определителя Слэтера — действительно, несложно видеть, что

$$\Psi^{(F)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \det \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}_1) & \psi_1(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_1(\mathbf{x}_N) \\ \psi_2(\mathbf{x}_1) & \psi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_2(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{x}_1) & \psi_N(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_N(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Работать с такими объектами уже достаточно сложно, ведь волновая функция содержит $N!$ слагаемых. Даже вычисление нормировки является достаточно неприятной задачей (особенно, если волновые функции не ортогональны). Тут мы постараемся построить язык, на котором с этими объектами окажется удобно работать — а именно, язык *вторичного квантования*.

⁴Будучи так записанной, волновая функция не нормирована

2.2.3 Построение базиса в Фоковском пространстве \mathcal{F}_N

Пусть имеется произвольный ортонормированный одночастичный базис $\{\psi_\lambda(\mathbf{x})\}$ (базис в \mathcal{F}_1). Пусть $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$ — какой-то набор из N базисных состояний (при этом, вообще говоря, какие-то из λ_n могут встречаться по несколько раз, а какие-то — не встречаться вовсе). Обозначим за $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle$ нормированную симметричную (или антисимметричную, если мы имеем дело с фермионами) комбинацию базисных волновых функций. В координатном представлении, оно имеет вид:

$$\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \lambda_1, \dots, \lambda_N \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \begin{array}{c} \Psi_{\lambda_1 \dots \lambda_N}^{(F)} \\ \Psi_{\lambda_1 \dots \lambda_N}^{(B)} \end{array} \right\} (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left\{ \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{\prod_\lambda (n_\lambda!)} \right\} \sum_{\sigma \in S_N} \left\{ \begin{array}{c} \text{sign} \sigma \\ 1 \end{array} \right\} \psi_{\lambda_{\sigma_1}}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{\lambda_{\sigma_N}}(\mathbf{x}_N) \quad (2.23)$$

Тут мы привели кроме всего прочего ещё и нормировочный множитель, который для бозонов содержит дополнительный комбинаторный множитель, зависящий от того, сколько раз та или иная λ повторяется (за что отвечают числа n_λ). Для того, чтобы понять его происхождение, полезно расписать явно $\int |\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)|^2 d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N$ для каких-то конкретных небольших чисел n_λ . Если в фермионном случае какая-то из λ встречается дважды, то несложно видеть, что это приводит к тождественному занулению всей волновой функции (это утверждение носит название принципа Паули): $|\dots, \lambda_i, \dots, \lambda_i, \dots\rangle \equiv 0$.

Кроме того, очевидно, что если переставить какие-то из λ_n , то получится (с точностью до ± 1) точно такая же волновая функция. Если мы выбросим все такие совпадения — например, будем рассматривать упорядоченные по неубыванию наборы⁵ — мы получим ортонормированный базис в \mathcal{F}_N . Если мы фиксируем порядок, то вместо набора $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$ можно описывать вектора набором чисел заполнения $\{n_\lambda\}$ (таких что $\sum_\lambda n_\lambda = N$), которые говорят нам, сколько раз каждая из λ встречается в наборе. Такое представление носит название *представления чисел заполнения*, а волновые функции в этом представлении обозначаются следующим образом:

$$|n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \left| (\lambda_1)_{n_1 \text{ раз}} \leq (\lambda_2)_{n_2 \text{ раз}} \leq \dots \leq (\lambda_N)_{n_N \text{ раз}} \right\rangle \quad (2.24)$$

Для фермионов допустимые числа заполнения, в силу принципа Паули, $n_\lambda \in \{0, 1\}$; в то время как для бозонов — $n_\lambda \in \{0, 1, 2, \dots\}$.

2.2.4 Операторы рождения и уничтожения частиц

Пространство Фока и вакуум

Даже если мы работаем с фиксированным числом частиц⁶ N , оказывается удобным избавиться от фиксирующего условия $\sum_\lambda n_\lambda = N$, и рассмотреть полное Фоковское пространство $\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{F}_N \oplus \dots$. Тут мы добавили весьма искусственный объект \mathcal{F}_0 — пространство Фока 0 частиц. Это — одномерное пространство, в котором лежит один-единственный вектор, который мы будем называть вакуумом $|0\rangle$ (не путать с обычным нулевым вектором $0!$) С точки зрения представления чисел заполнения, вакуум представляет собой вектор $|n_\lambda \equiv 0\rangle$.

Теперь мы вплотную подошли к введению операторов рождения и уничтожения частиц — операторов $\hat{a}_\lambda^\dagger : \mathcal{F}_i \rightarrow \mathcal{F}_{i+1}$ и $\hat{a}_\lambda : \mathcal{F}_{i+1} \rightarrow \mathcal{F}_i$. Введём эти операторы конструктивно — а именно, зададим их действие на базисные вектора. Для бозонов и фермионов эти операторы, конечно же, вводятся по-разному.

Фермионы

Удобнее всего оператор рождения определить по действию на вектора даже не в представлении чисел заполнения, а на шаг раньше — на детерминанты Слэтера, следующим образом:

$$\hat{a}_\lambda^\dagger |\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} |\lambda, \lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle, & \lambda \notin \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \\ 0, & \lambda \in \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \end{cases} \quad (2.25)$$

(таким образом, он дописывает λ в начало — *рождает* частицу в состоянии λ). Если вспомнить, что эти волновые функции антисимметричны по произвольной перестановке двух λ , то видно, что произвольные операторы \hat{a}_λ^\dagger и \hat{a}_μ^\dagger , *антикоммутируют* — то есть $\{\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger\} = 0$ (тут введено обозначение антикоммутатора $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$). Для того, чтобы понять, как оператор \hat{a}_λ^\dagger действует на волновые функции в представлении чисел заполнения — достаточно вспомнить, что после добавления λ в начало необходимо упорядочить набор. При перестановке двух соседних λ_n меняется знак волновой

⁵Для этого, вообще говоря, квантовые числа нужно тоже как-то упорядочить — сказать, какое из состояний идёт «раньше», а какое — «позже». Такая процедура упорядочения может быть плохо определена, если квантовое число λ непрерывно. В дальнейшем мы увидим, что от этого порядка, впрочем, ничего не зависит, и проблем никаких не возникает — поэтому оставим этот вопрос математикам

⁶А часто это бывает не так — например, большой канонический ансамбль в статистической физике представляет собой ансамбль систем с нефиксированным числом частиц

функции; а меняться он будет ровно столько раз, сколько $\lambda_n \leq \lambda$ имеются в наборе. Таким образом, мы можем записать следующее тождество:

$$\hat{a}_\lambda^\dagger |n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum_{k=1}^{\lambda-1} n_k} |n_1, \dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle, & n_\lambda = 0 \\ 0, & n_\lambda = 1 \end{cases} \quad (2.26)$$

Наконец, оператор $\hat{a}_\lambda \equiv (\hat{a}_\lambda^\dagger)^\dagger$ можно построить просто как эрмитово сопряжение. Можно легко убедиться, что этот оператор действует следующим образом:

$$\hat{a}_\lambda |n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \begin{cases} 0, & n_\lambda = 0 \\ (-1)^{\sum_{k=1}^{\lambda-1} n_k} |n_1, \dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle, & n_\lambda = 1 \end{cases} \quad (2.27)$$

(и тем самым, он *уничтожает* частицу в состоянии λ). Непосредственной проверкой можно убедиться, что построенные таким образом операторы удовлетворяют следующей алгебре:

$$\{\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger\} = \{\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu\} = 0, \quad \{\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu^\dagger\} = \delta_{\lambda\mu}. \quad (2.28)$$

Эта алгебра очень похожа на алгебру осцилляторов, с единственным отличием (отражающим то, что мы имеем дело с фермионами) — операторы антикоммутируют вместо коммутации. Наконец, несложно заметить, что оператор числа частиц имеет вид $\hat{n}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda$:

$$\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle = \begin{cases} 0, & n_\lambda = 0 \\ |\dots, n_\lambda = 1, \dots\rangle, & n_\lambda = 1 \end{cases} \equiv n_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle \quad (2.29)$$

Бозоны

С бозонами — чуть проще, поскольку никаких лишних множителей «-1» нигде не возникает. Лестничные операторы — операторы рождения и уничтожения — определим следующим образом:

$$\begin{cases} \hat{a}_\lambda^\dagger |\dots, n_\lambda, \dots\rangle & \stackrel{def}{=} \sqrt{n_\lambda + 1} |n_1, \dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle \\ \hat{a}_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle & \stackrel{def}{=} \sqrt{n_\lambda} |n_1, \dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle \end{cases} \quad (2.30)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что построенные таким образом операторы являются действительно эрмитово сопряжёнными; они коммутируют между собой; а их алгебра записывается следующим образом:

$$[\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger] = [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu] = 0, \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu^\dagger] = \delta_{\lambda\mu}$$

(собственно, численные факторы $\sqrt{n_\lambda + 1}$ и $\sqrt{n_\lambda}$ специально были подобраны так, чтобы алгебра совпала со стандартной алгеброй лестничных операторов для осциллятора и оператор числа частиц в состоянии λ выглядел как $\hat{n}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda$ (это потребует ниже).

2.2.5 Замена базиса

До сих пор при построении набора операторов рождения и уничтожения, мы привязывались к конкретному выбору одночастичного базиса $\{\psi_\lambda(\mathbf{x})\}$. На самом деле, если мы повторим процедуру для другого произвольного базиса $\{\psi'_\lambda(\mathbf{x})\}$, то соответствующие им операторы $\hat{a}_{\lambda'}$ будут связаны с исходными линейным преобразованием, которое можно найти из следующей тривиальной цепочки равенств:

$$|\lambda'\rangle = \hat{a}_{\lambda'}^\dagger |0\rangle \equiv \sum_\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | \lambda'\rangle = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \langle \lambda | \lambda'\rangle |0\rangle \quad (2.31)$$

Следовательно, если мы захотим работать в ином базисе, преобразование операторов рождения и уничтожения происходит следующим образом⁷

$$\hat{a}_{\lambda'}^\dagger = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \langle \lambda | \lambda'\rangle, \quad \hat{a}_{\lambda'} = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda \langle \lambda' | \lambda\rangle \quad (2.32)$$

⁷Приведённое тут рассуждение, вообще говоря, показывает лишь, что эти операторы одинаково действуют на вакуум $|0\rangle$, но не доказывает операторное тождество — по-хорошему, его нужно проверять на всех базисных векторах полного пространства Фока. Тем не менее, это утверждение достаточно интуитивно, и поэтому доказывать мы его не будем.

Несложно проверить, что определённые таким образом операторы сохраняют коммутационные соотношения:

$$[\hat{a}_{\lambda'}, \hat{a}_{\mu'}^\dagger]_{\mp} = \sum_{\lambda\mu} \langle \lambda' | \lambda \rangle \langle \mu | \mu' \rangle [\hat{a}_{\lambda}, \hat{a}_{\mu}^\dagger]_{\mp} = \sum_{\lambda} \langle \lambda' | \lambda \rangle \langle \lambda | \mu' \rangle = \langle \lambda' | \mu' \rangle = \delta_{\lambda' \mu'}$$

В частности, в качестве базиса можно выбирать и непрерывные квантовые числа — например, координатный базис. Полученные таким образом операторы стандартно обозначают как $\hat{a}_{\lambda'} = \hat{a}_{\mathbf{x}} \equiv \hat{\psi}(\mathbf{x})$, и по физическому смыслу, оператор $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ уничтожает частицу в точке \mathbf{x} , а $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$ — рождает её. В этом представлении операторы рождения и уничтожения являются полевыми операторами, и называются **пси-операторами**. При этом, формулы перехода к этому базису и обратно, а также алгебра записываются следующим образом:

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_{\lambda} \hat{a}_{\lambda} \psi_{\lambda}(\mathbf{x}), \quad \hat{a}_{\lambda} = \int \hat{\psi}(\mathbf{x}) \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.33)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}), \quad \hat{a}_{\lambda}^\dagger = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \psi_{\lambda}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.34)$$

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})]_{\mp} = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.35)$$

Эти тождества подводят нас вплотную к квантовой теории поля.

2.2.6 Вторичное квантование

Пусть имеется какой-то одночастичный эрмитов оператор $\hat{O} : \mathcal{F}_1 \rightarrow \mathcal{F}_1$, со спектром $\{o_{\lambda}\}$ и собственными функциями $\psi_{\lambda}(\mathbf{x})$. В многочастичном случае, типично, мы работаем с операторами $\hat{O} : \mathcal{F}_N \rightarrow \mathcal{F}_N$ вида $\hat{O} = \sum_{n=1}^N \hat{O}_n$. Такое представление для операторов называется *первично-квантованным*.

Выберем в качестве базиса для пространства Фока базис, построенный из этих самых собственных функций. В таком случае, тривиально убедиться в следующей цепочке равенств:

$$\hat{O} |n_1, \dots, n_{\lambda}, \dots\rangle = \sum_{\lambda} n_{\lambda} o_{\lambda} |n_1, \dots, n_{\lambda}, \dots\rangle = \sum_{\lambda} o_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\lambda} |n_1, n_2, \dots\rangle \Rightarrow \hat{O} = \sum_{\lambda} o_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\lambda} \quad (2.36)$$

Это тождество позволяет выразить оператор $\hat{O} : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$ через лестничные операторы; операторы, записанные таким образом, называются *вторично-квантованными*. Это операторное тождество теперь можно переписать и в произвольном базисе:

$$\hat{O} = \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | \hat{O} | \mu \rangle \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mu} \quad (2.37)$$

(при этом $\langle \lambda | \hat{O} | \mu \rangle$ — обычный матричный элемент, взятый по *одночастичным* волновым функциям). В частности, используя координатный базис, получим:

$$\hat{O} = \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \langle \mathbf{x} | \hat{O} | \mathbf{x}' \rangle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}'). \quad (2.38)$$

Обычно одночастичные операторы локальны в координатном представлении и эту формулу можно переписать в виде⁸:

$$\hat{O} = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{O} \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (2.39)$$

(при этом оператор \hat{O} в правой части нужно понимать как его координатное представление — то есть оператор, действующий на координатную зависимость ψ -оператора⁹!).

Приведём несколько примеров:

⁸Например, для оператора производной $\hat{O} = \nabla$ получим с использованием волновых функций координатного базиса $|\mathbf{x}\rangle : \psi_{\mathbf{x}}(\mathbf{X}) = \delta(\mathbf{X} - \mathbf{x})$

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \langle \mathbf{x} | \nabla | \mathbf{x}' \rangle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}') &= \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}') \int d\mathbf{X} \delta(\mathbf{X} - \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{X}} \delta(\mathbf{X} - \mathbf{x}') = - \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}') \int d\mathbf{X} \delta(\mathbf{X} - \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}'} \delta(\mathbf{X} - \mathbf{x}') = \\ &= - \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}') \nabla_{\mathbf{x}'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}'} \hat{\psi}(\mathbf{x}') = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\psi}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

в соответствии с формулой (2.39).

⁹Такой объект как, например, $\nabla \hat{\psi}(\mathbf{x})$ — где набла действует как бы на оператор — нужно понимать в том же смысле, в котором мы совершали преобразование Фурье операторов. А именно, если взять произвольный матричный элемент $\langle \psi_1 | \hat{\psi}(\mathbf{x}) | \psi_2 \rangle$, то получится обычная функция переменной \mathbf{x} . Если эту полученную функцию мы продифференцируем — мы по определению и получим действие оператора $\nabla \hat{\psi}(\mathbf{x})$.

1. Например, из обычной квантовой механики мы помним, что $|\psi(\mathbf{x}_0)|^2$ обозначает плотность вероятности обнаружить частицу в точке \mathbf{x}_0 . Ей соответствует одночастичный оператор $\hat{\rho}(\mathbf{x}_0) = \delta(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_0)$. Значит, оператор *плотности числа частиц* во вторично-квантованном представлении имеет следующий вид:

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}_0) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_0)\hat{\psi}(\mathbf{x}_0) \quad (2.40)$$

2. Другой пример — гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = \sum_n \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\mathbf{x}_i) \right) \equiv \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) \right] \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (2.41)$$

3. Без доказательства приведём, что оператор парного взаимодействия во вторично-квантованном представлении запишется следующим образом:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_1) \quad (2.42)$$

В целом, работает следующее мнемоническое правило. Построение представления вторичного квантования для различных операторов устроено как будто мы «усредняем» исходный оператор по какой-то волновой функции $\psi(\mathbf{x})$, а затем попросту навешиваем «шляпки», заменяя волновую функцию на пси-операторы.

Глава 3

Применения аппарата квантовой теории поля

3.1 Графы

3.1.1 Решёточное преобразование Фурье

Везде в этом семинаре, когда мы будем говорить о периодических системах — мы будем иметь в виду системы конечного размера (N элементарных ячеек) с периодическими граничными условиями. Объём системы тоже конечен и обозначается V . Поэтому мы везде будем иметь дело с дискретными преобразованиями Фурье (в размерности d). Поэтому сперва напомним, как устроено дискретное преобразование Фурье.

Пусть имеется какая-то функция $f(\mathbf{r})$, определённая на периодической решётке с векторами трансляции $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_d\}$, так что $\mathbf{r} = \sum_i n_i \mathbf{a}_i$. Пусть при этом мы имеем дело с периодическими граничными условиями, так что $f(\mathbf{r} + N_1 \mathbf{a}_1) \equiv f(\mathbf{r} + N_2 \mathbf{a}_2) \equiv \dots \equiv f(\mathbf{r})$ (N_i задают длину периода, так что полное число элементарных ячеек, очевидно, равно $N = N_1 \dots N_d$). Более общо, это условие можно записать в следующем виде:

$$\forall m_i \in \mathbb{Z} \mapsto f\left(\mathbf{r} + \sum_i m_i N_i \mathbf{a}_i\right) \equiv f(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

Для произвольной решётки можно ввести **вектора обратной решётки** $\{\mathbf{G}_i\}_{i=1}^d$, определяемые из условия $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_j = 2\pi \delta_{ij}$ («дуальный базис»). Решётка, образованная трансляциями на вектора \mathbf{G} называется *дуальной решёткой*, или k -пространством. В k -пространстве особое значение имеют вектора $\mathbf{k} = \sum_i \frac{k_i}{N_i} \mathbf{G}_i$ ($\forall k_i \in \mathbb{Z}$) — при этом вектора при k_i и $k_i + N_i$ отличаются на вектор \mathbf{G}_i , и с точки зрения периодичности k -пространства они эквивалентны; поэтому все такие вектора перечисляются $k_i = 0, \dots, N_i - 1$ (или любой другой отрезок из N_i целых чисел); и количество таких векторов точно такое же, как и количество элементарных ячеек — N . Дискретное преобразование Фурье определяется следующим образом:

$$\boxed{f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},} \quad (3.2)$$

с следующими обозначениями:

$$\sum_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \equiv \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \dots \sum_{n_d=0}^{N_d-1} f(n_1 \mathbf{a}_1 + \dots + n_d \mathbf{a}_d), \quad \sum_{\mathbf{k}} \tilde{f}(\mathbf{k}) \equiv \sum_{k_1=0}^{N_1-1} \dots \sum_{k_d=0}^{N_d-1} \tilde{f}\left(\frac{k_1}{N_1} \mathbf{G}_1 + \dots + \frac{k_d}{N_d} \mathbf{G}_d\right) \quad (3.3)$$

Они согласованы благодаря выполнению следующих условий:

$$\sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = N \delta_{\mathbf{k},0}, \quad \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = N \delta_{\mathbf{k},0} \quad (3.4)$$

Последние два условия можно проверить непосредственно, заметив, что при $\mathbf{k}\mathbf{r} = (\sum_i n_i \mathbf{a}_i) \cdot (\sum_j \frac{k_j}{N_j} \mathbf{G}_j) = \sum_i \frac{n_i k_i}{N_i}$. При n_i или k_i не кратным N_i , сумма экспонент с такими мнимыми показателями занулится; а при кратным — будет даваться суммой единиц.

3.1.2 Модели сильной связи

В физике твёрдого тела часто приходится рассматривать задачи, в которых электрон движется в периодической решётке, составленной из каких-то притягивающих центров (атомов), образующих периодический потенциал:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_n U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (3.5)$$

(\mathbf{r}_n — координаты центра n -го атома; и \mathbf{r}_n образуют какую-то периодическую структуру — решётку).

Если атомы пространственно разнесены на достаточно большое расстояние¹ (какое именно — будет обсуждено чуть позже), то для решения такой задачи разумно «стартовать» с атомных орбиталей — решений уравнения Шрёдингера для отдельного атома, в потенциале $U_0(\mathbf{r})$. Как правило, у отдельных атомов имеется набор каких-то связанных состояний $\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})$, соответствующих (отрицательным) уровням энергии $-\varepsilon_n$; для простоты мы будем считать, что уровень энергии один. Поскольку $U_0(\mathbf{r} \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, то такие волновые функции на больших расстояниях затухают экспоненциально $\psi^{(0)}(\mathbf{r}) \sim \exp(-r/a_B)$. Характерный масштаб такого затухания $a_B = \sqrt{2m\varepsilon}$, по аналогии с атомом водорода, называется *эффективным Боровским радиусом*. Модели сильной связи хорошо описывают такую систему в пределе, когда расстояние между атомами $a \gg a_B$, и перекрытия волновых функций, живущих на разных атомах, экспоненциально малы (и экспоненциально убывают по мере рассматривания все более дальних соседей): $\int d\mathbf{r} \psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) \sim \exp(-|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|/a_B)$.

Если предположить, что эти перекрытия вообще равны нулю, то получится система из N невзаимодействующих атомов. Состояния $\langle \mathbf{r} | n^{(0)} \rangle = \psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ образуют ортонормированный базис, и имеется N -кратно вырожденный уровень энергии $-\varepsilon$. Учет экспоненциально малых перекрытий приводит к расщеплению уровня и превращения его в зону (в пределе бесконечного кристалла $N \rightarrow \infty$), структура которой хорошо описывается на языке моделей сильной связи.

Гамильтониан сильной связи

Вышеизложенная логика мотивирует следующий гамильтониан²:

$$\hat{H} = -\varepsilon \sum_i |i\rangle \langle i| - \sum_{i \neq j} t_{ij} (|i\rangle \langle j| + |j\rangle \langle i|) \quad (3.6)$$

Первый член описывает энергию электрона на i -ом атоме (ε на каждом в нашей модели). *Туннельные матричные элементы* t_{ij} задают амплитуду перехода электрона на соседний атом; силу трансляционной симметрии, они зависят только от расстояния между атомами и спадают экспоненциально с расстоянием $t_{ij} \equiv t(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \sim \exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/a_B)$. Поэтому чаще всего ограничиваются приближением ближайших соседей (*nearest neighbor hopping*). Выражение (3.6) и называется гамильтонианом сильной связи, или *прыжковым гамильтонианом*.

У приведённого рассуждения есть два недостатка (помимо отсутствия вывода):

1. Исходные орбитали $|n^{(0)}\rangle$, вообще говоря, не являются ортогональными и поэтому не образуют ортонормированный базис. С этой проблемой в принципе можно справиться, записав матрицу Грамма $\langle n^{(0)} | m^{(0)} \rangle$ и диагонализовав её, получив уже ортонормированный набор $\{|i\rangle\}$.
2. Коэффициенты t_{ij} , определяемые через перекрытия атомных орбиталей, получаются неправильными³, хотя экспоненциальная зависимость воспроизводится верно. Нахождение правильных матричных элементов по сложности сравнимо с решением исходной задачи — настоящего уравнения Шрёдингера в периодическом потенциале. Эта проблема решается тем, что t_{ij} объявляются феноменологическими параметрами — замечательно то, что параметров нужно очень мало, а именно — туннельные элементы между соседями. Ценность модели при этом заключается в том, что она предсказывает множество физических свойств (в первую очередь, спектр).

Дальше будет изложен способ более строгого обоснования гамильтониана (3.6). Хотя, как было отмечено выше, он требует нахождения решения уравнения Шрёдингера — но построение гамильтониана такого вида, тем не менее, базируется лишь на самых общих свойствах такого решения.

Блоховские волновые функции

Стандартный наблюдение о движении электронов в периодическом потенциале заключается в том, что гамильтониан коммутирует с операторами конечных трансляций на базисные вектора решётки $[\hat{H}, \hat{T}_\mathbf{a}] = 0$, и поэтому можно искать собственные функции гамильтониана в виде собственных функций этого оператора (оператор унитарен, поэтому его собственные числа — это фазовые множители $e^{i\varphi}$). Последние называются **Блоховскими волновыми функциями**, и устроены они следующим образом:

¹Из аналитически доступных методов, часто рассматривают **модель слабой связи**, или **модель почти свободных электронов**, которая стартует со свободных электронов в пространстве без потенциала, а потенциал рассматривается по теории возмущений

²Знак минус перед вторым членом — это договорённость, мотивированная следующим соображением: основное состояние для системы, скажем, из двух атомов, должно быть симметричным. Несложно видеть, что основное состояние системы $\hat{H} = -t(|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|)$ — это волновая функция $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

³Это более или менее связано с тем, что не учитываются виртуальные переходы в другие атомарные состояния

$$\hat{T}_a |\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} |\mathbf{k}\rangle \Rightarrow \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \hat{H} |\mathbf{k}\rangle = \epsilon(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle \quad (3.7)$$

Квантовое число \mathbf{k} пробегает первую зону Бриллюэна периодической решётки, и совокупность собственных функций гамильтониана с разными \mathbf{k} образуют *энергетическую зону*; $\epsilon(\mathbf{k})$ задаёт *закон дисперсии* для электронов в этой зоне. Если поместить систему в «ящик» конечного объема V , то блоховские волновые функции к тому же можно выбрать ортонормированными:

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle \equiv \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Rightarrow \int d\mathbf{r} |u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (3.8)$$

Состояния Ванье (Wannier states)

В рамках приближения сильной связи функция $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ должна быть существенно отлична от нуля только в окрестности притягивающих центров (в классически разрешённой области), а в пределе $a \rightarrow \infty$ она буквально представляет собой суперпозицию состояний на отдельных атомах. Поэтому обратное преобразование Фурье таких функций, которое устроено следующим образом:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_n} \Rightarrow \langle \mathbf{r} | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)} \equiv \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (3.9)$$

окажется экспоненциально близко к исходным атомным орбиталам $\psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$. Однако, в отличие от последних, они уже будут образовывать *ортонормированную систему*, в чём можно убедиться непосредственно:

$$\langle n | m \rangle \equiv \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)} u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)} = \delta_{nm} \quad (3.10)$$

Такие состояния называются **состояниями Ванье**. Ещё раз подчеркнём, что они строятся через точные решения уравнения Шрёдингера $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, и их нахождение представляет собой сложную задачу. В результате *правильный* гамильтониан (3.6), в действительности, пишется именно в базисе состояний Ванье; а общая аргументация про вид матричных элементов t_{ij} , приведённая выше, переносится непосредственно и сюда.

Вторичное квантование

Наконец, если в периодическом потенциале движется *много* электронов, то можно написать прыжковый гамильтониан в представлении вторичного квантования. Более конкретно, можно построить операторы \hat{a}_n^\dagger и \hat{a}_n , рождающие или уничтожающие электрон в состоянии Ванье на атоме n ; и в силу ортогональности состояний Ванье, коммутационные соотношения будут иметь стандартный вид для фермионов $\{\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger\} = \delta_{nm}$ ⁴. Гамильтониан же, переписанный через эти состояния, будет иметь следующий вид:

$$\hat{H} = -\epsilon \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n - t \sum_{\langle nm \rangle} (\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n), \quad \{\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger\} = \delta_{nm} \quad (3.11)$$

На таком языке диагонализация гамильтониана означает приведение его к виду $-\sum_l \tilde{\epsilon}_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$ с помощью *преобразования Боголюбова* (канонического преобразования операторов \hat{a}_n — сохраняющего коммутационные соотношения), такая процедура, разумеется, эквивалентна диагонализации матрицы гамильтониана в первичном квантовании.

Пример. Одномерная задача

Давайте рассмотрим в качестве примера одномерный прыжковый гамильтониан, образующий трёхдиагональную матрицу:

$$\hat{H} = -\epsilon \sum_n |n\rangle \langle n| - t \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) = - \begin{pmatrix} \epsilon & t & 0 & 0 & 0 & \dots \\ t & \epsilon & t & 0 & 0 & \dots \\ 0 & t & \epsilon & t & 0 & \dots \\ 0 & 0 & t & \epsilon & t & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & t & \epsilon & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

⁴Конечно же, модель сильной связи можно записать и для бозонов

Такой гамильтониан может описывать, например, известную задачу про Дираковскую гребёнку в пределе большого расстояния между атомами. Важно, что вся информация о микроскопической структуре задачи свелась лишь к паре вещественных параметров — ϵ и t (на самом деле ϵ задаёт лишь общий сдвиг энергии, и в этом смысле совершенно не существенно). Из состояний Ванье можно собрать Блоховские состояния:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} |n\rangle \quad (3.13)$$

$$\hat{H} |k\rangle = \epsilon_k |k\rangle, \quad \epsilon_k = -\epsilon - 2t \cos ka \quad (3.14)$$

(a — шаг решётки в реальном пространстве; k — волновой вектор из зоны Бриллюэна $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$). Таким образом, модель сильной связи сразу говорит, что в окрестности энергии $-\epsilon$ имеется энергетическая зона шириной $4t$; и более того, с её помощью можно показать, что закон дисперсии будет универсальным и даваться косинусом⁵!

Это решение непосредственно обобщается и на язык вторичного квантования. Стартуя с исходного гамильтониана:

$$\hat{H} = -\epsilon \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n - t \sum_n (\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n+1} + \hat{a}_{n+1}^\dagger \hat{a}_n), \quad \{\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger\} = \delta_{nm}, \quad (3.15)$$

мы совершаем преобразование Фурье:

$$\hat{a}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \hat{a}_n e^{-ikn}, \quad \hat{a}_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \hat{a}_n^\dagger e^{ikn} \Rightarrow \{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}, \quad (3.16)$$

которое после подстановки приводит гамильтониан к диагональному виду с точно таким же законом дисперсии:

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (3.17)$$

3.1.3 Графен

Геометрия

Графен представляет собой двумерный кристалл из атомов углерода с решёткой типа “медовые соты” (honeycomb lattice). Решётка представляет собой 2 вложенные треугольные решетки Браве — элементарная ячейка состоит из двух атомов; а базисные вектора можно выбрать в виде (a — длина ребра шестиугольника):

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} a, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 3/2 \end{pmatrix} a \quad (3.18)$$

Вектора трансляции дуальной решётки определяются из условия $\mathbf{a}_i \mathbf{G}_j = 2\pi \delta_{ij}$; и их можно выбрать следующими:

$$\mathbf{G}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_2 = \frac{4\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

Элементарная ячейка обратного пространства — *ячейка Вигнера-Зейца*, *зона Бриллюэна* — представляет собой правильный шестиугольник со стороной $K = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$ (смотри рисунок).

Гамильтониан

Электроны проводимости в графене образуются из sp^2 -гибридизованных атомных орбиталей атомов углерода. Для их описания отлично подходит модель сильной связи, которая записывается следующим образом:

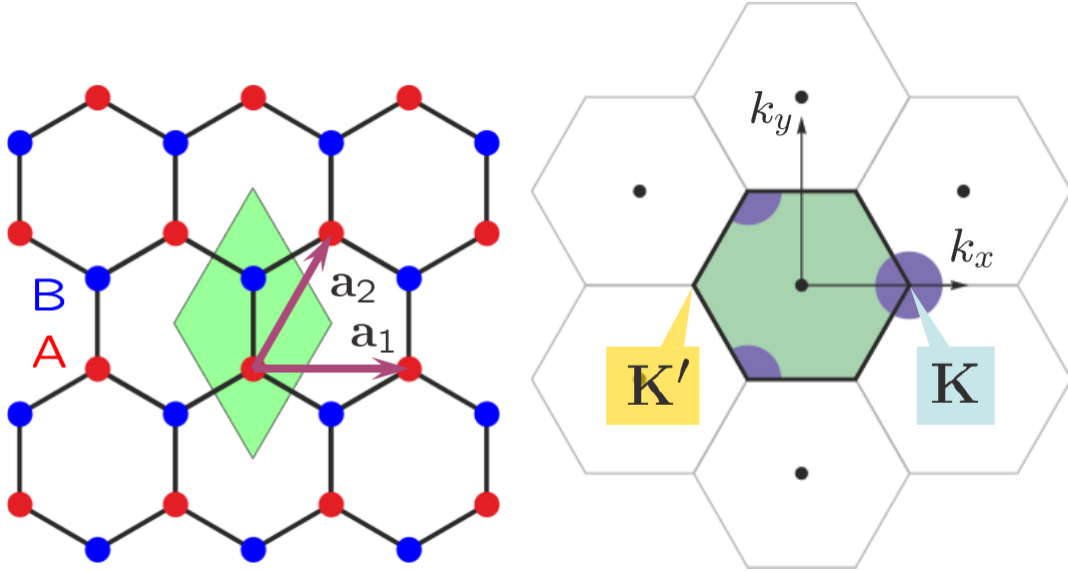
$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \rangle} (\hat{a}_{\mathbf{r}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2} + h.c.) \quad (3.20)$$

(суммирование проводится по всем рёбрам). Поскольку решётка представляет собой две вложенных решетки Браве, то дальше будет удобно явно выделить операторы, относящиеся к одной и к другой подрешётке. Для этого мы введём индекс $\alpha \in \{A, B\}$ (*пространство подрешёток*), а также явно выделим вектора, указывающие на ближайших соседей:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} a, \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \begin{pmatrix} -\sqrt{3}/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} a \quad (3.21)$$

В таком случае вместо суммирования по всем атомам, можно проводить суммирование по всем элементарным ячейкам \mathbf{r} и векторам смещения $\boldsymbol{\delta}$:

⁵Это, конечно, можно продемонстрировать на примере той же Дираковской гребёнки явно



(а) Элементарная ячейка в прямом пространстве (b) Элементарная ячейка в обратном пространстве (зона Бриллюэна)

Рис. 3.1: Решётка графена

$$\hat{H} = -t \sum_{\mathbf{r}, \delta} (\hat{a}_{\mathbf{r}, A}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}+\delta, B} + h.c.) \quad (3.22)$$

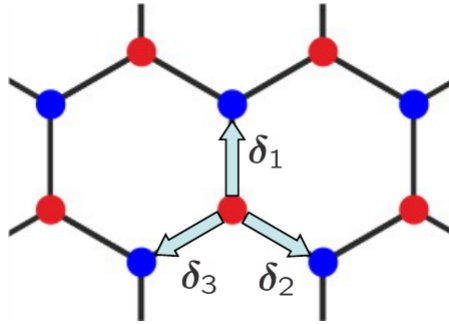


Рис. 3.2: Направления на ближайшие соседи

Только после перехода к суммированиям по ячейкам, мы можем провести дискретное преобразование Фурье (3.2) операторов $\hat{a}_{\mathbf{r}}$. Несложно проверить, что преобразование Фурье является каноническим (унитарным) преобразованием, то есть оно сохраняет коммутационные соотношения $\{\hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}, \hat{a}_{\mathbf{q}, \beta}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{kq}} \delta_{\alpha\beta}$. Проводя суммирование по \mathbf{r} , мы приходим к *Блоховскому* гамильтониану следующего вида:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}, \beta}, \quad H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \equiv -t \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad f_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta} \quad (3.23)$$

(по повторяющимся индексам проводится суммирование). При фиксированном индексе гамильтониан представляет собой матрицу 2×2 в пространстве подрешеток. Это — почти диагональный вид; для того, чтобы привести гамильтониан к диагональному виду, нужно провести еще одно унитарное преобразование операторов $\{\hat{a}_{\mathbf{k}, A}, \hat{a}_{\mathbf{k}, B}\} \mapsto \{\hat{a}_{\mathbf{k}, +}, \hat{a}_{\mathbf{k}, -}\}$, “перемешивающее” подрешётки и диагонализующее матрицу $H_{ij}(\mathbf{k})$. После такого преобразования мы получим явно диагональный вид гамильтониана:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=\pm} E_{\mathbf{k}}^{(i)} \hat{a}_{\mathbf{k}, i}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, i}, \quad E_{\mathbf{k}}^{(i)} = \pm t |f_{\mathbf{k}}|$$

У спектра тем самым будут две ветви (индекс $i = \pm$ обозначает верхнюю и нижнюю ветви).

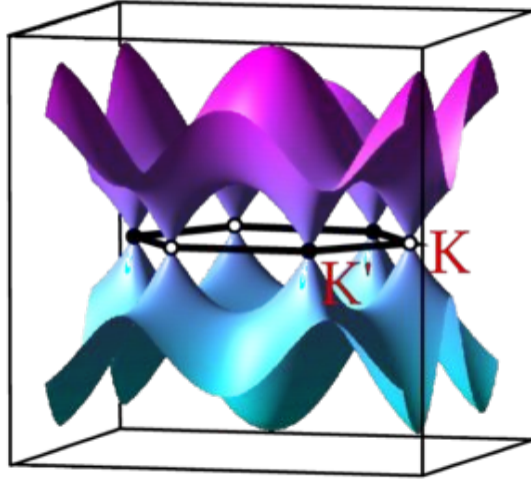


Рис. 3.3: Спектр графена $E_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$

Киральная симметрия

Легко видеть, что Блоховский гамильтониан $H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \equiv -t \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}$ раскладывается по двум матрицам Паули σ_x, σ_y и, следовательно, антикоммутирует с матрицей σ_z :

$$\{H_{\alpha\beta}, \hat{C}\} = 0, \quad \hat{C} = \sigma_z.$$

Эта симметрия называется киральной и является следствием того, что прыжковый гамильтониан в приближении ближайших соседей содержит прыжки только между разными подрешетками (неважный диагональный член, пропорциональный единичной матрице можно уничтожить сдвигом энергии). Киральная симметрия является приближенной, так включение прыжков на соседей, следующих за ближайшими, будет содержать прыжки внутри одной подрешетки, в гамильтониане появится слагаемое, пропорциональное σ_z и гамильтониан перестанет антикоммутировать с σ_z . Матрицу киральной симметрии \hat{C} можно записать и в исходном координатном представлении, она будет диагональной, действующей, как $+1$ на одной подрешетке и -1 на другой подрешетке.

Из киральной симметрии следует, что для любого уровня на энергии $+E$ найдется другой уровень на энергии $-E$, спектр симметричен относительно замены $E \rightarrow -E$, что мы и наблюдаем. Действительно, пусть $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, тогда состояние $\hat{C}|\psi\rangle$ будет тоже собственным с энергией $-E$: $\hat{H}\hat{C}|\psi\rangle = -\hat{C}\hat{H}|\psi\rangle = -E\hat{C}|\psi\rangle$.

Основное состояние

Наиболее интересным свойством графена заключается то, что спектр зануляется (и обе ветви спектра при этом соприкасаются) в паре Дираковских точек в зоне Бриллюэна: $\mathbf{K} = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}; 0\right)$ и $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$. У графена каждый атом углерода имеет один электрон в sp^2 -гибридизованном состоянии, и таким образом всего в исследуемой зоне имеется $2N$ электронов (напомним, N — число элементарных ячеек, а число атомов как раз вдвое больше!). С другой стороны, в k -пространстве имеется ровно N допустимых значений k , и каждому k соответствует ровно два состояния (на верхней и нижней ветвях спектра). Наконец, не стоит забывать, что электроны обладают спином (спиновая структура гамильтониана при этом диагональная), поэтому каждое из этих двух состояний к тому же двукратно вырождено. Поэтому в зоне Бриллюэна имеется $4N$ состояний. При нуле температур тем самым ровно половина всех состояний свободна (верхняя «+» ветвь спектра), и половина — занята (нижняя «-» ветвь спектра).

Низкоэнергетические возбуждения

Поэтому низкоэнергетические возбуждения будут возникать вблизи обозначенных двух Дираковских точек. Окрестности этих точек в k -пространстве называют долинами (тем самым, говорят о K -долине и K' -долине графена). Для электронных операторов тем самым естественно ввести дополнительный «долинный» индекс $a = \{K, K'\}$ (вдобавок к уже имевшемуся индексу подрешёток $\alpha = \{A, B\}$), и ввести следующее обозначение:

$$\hat{a}_{\mathbf{k}, K} \equiv \hat{a}_{\mathbf{K}+\mathbf{k}}, \quad \hat{a}_{\mathbf{p}, K'} \equiv \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{K}', i} \quad (3.24)$$

Для малых импульсов \mathbf{p} (таких что $pa \ll 1$) наборы операторов не пересекаются, и долины можно считать независимыми. Будем пока рассматривать K -долину. Проведём разложения спектра, используя явный вид векторов δ :

$$f_{\mathbf{K}+\mathbf{p}} \equiv \exp(ip_y a) + e^{i\frac{2\pi}{3}} \exp\left(i\frac{\sqrt{3}}{2}p_x a - i\frac{1}{2}p_y a\right) + e^{-i\frac{2\pi}{3}} \exp\left(-i\frac{\sqrt{3}}{2}p_x a - i\frac{1}{2}p_y a\right) \approx -\frac{3a}{2}(p_x - ip_y) \quad (3.25)$$

$$H_{\alpha\beta}^{(K)}(\mathbf{p}) \equiv -t \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{K}+\mathbf{p}} \\ f_{\mathbf{K}+\mathbf{p}}^* & 0 \end{pmatrix} \approx v \cdot \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \equiv v(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{p}), \quad v \equiv \frac{3}{2}ta \quad (3.26)$$

(тут матрицы σ_i — матрицы Паули, действующие в пространстве подрешёток). Диагонализация этого гамильтониана приводит к закону дисперсии $E_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \pm v|\mathbf{p}|$; и тем самым v определяет попросту групповую скорость электронов. Поэтому гамильтониан для долины K устроен следующим образом:

$$\hat{H}^{(K)} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p},\alpha}^\dagger v(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \mathbf{p}) \hat{a}_{\mathbf{p},\beta} \quad (3.27)$$

Отметим ещё раз, что суммирование по импульсам производится покуда $pa \ll 1$ — именно в таких пределах работает разложение, и именно для таких импульсов долины можно считать независимыми. Таким образом, в записанной таким образом низкоэнергетической теории естественным образом возникает обрезка $\Lambda \simeq \frac{1}{a}$.

Непрерывный предел

Для данной теории можно построить непрерывный предел, который формально соответствует пределу $a \rightarrow 0$, зафиксировав при этом макроскопические параметры — площадь листа $S = \text{const}$ и скорость возмущений $v = \text{const}$. Зона Бриллюэна при этом становится бесконечной, а операторы $\hat{a}_{\mathbf{r}}$ превратятся в непрерывные поля. Непрерывный предел строится по следующим естественным правилам:

- Пространственные суммы заменяются на интегралы согласно (тут S_0 — площадь элементарной ячейки графена в реальном пространстве):

$$\sum_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \mapsto \int \frac{d^2\mathbf{r}}{S_0} f(\mathbf{r}), \quad S_0 = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2 \quad (3.28)$$

- Из предыдущего правила следует, что символ кронекера (на дискретной решётке) и дельта-функция (его непрерывный аналог) связаны следующим образом $\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \mapsto S_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.
- Поскольку *микроскопическая* величина S_0 (из замены суммы на интеграл) не должна войти в окончательный гамильтониан, то полевые операторы стоит ввести согласно определению $\hat{\psi}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{S_0}}\hat{a}_{\mathbf{r}}$. Эквивалентно это же можно понять исходя из того, что мы хотим получить операторы с коммутационными соотношениями $\{\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.
- Таким образом, непрерывный предел соответствует следующим двум заменам (тут $S = S_0N$ — площадь всего листа графена):

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{S}} \int d^2\mathbf{r} \hat{\psi}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.29)$$

(обратите внимание, что формально суммирование теперь проводится по всем значениям \mathbf{k} , в силу бесконечности зоны Бриллюэна). Дальнейшее построение непрерывного предела, имея гамильтониан, записанный в Фурье, прямолинейно — необходимо подставить операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}}$. Суммирование по импульсам при этом проводится согласно следующему соотношению:

$$\frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \equiv f(-i\nabla) \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} = f(\hat{\mathbf{p}})\delta(\mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\nabla \quad (3.30)$$

(«оператор импульса» в данном случае не является оператором в квантомеханическом смысле!). Подставляя всё и проводя суммирование, мы окончательно получаем следующий «полевой» гамильтониан:

$$\hat{H}^{(K)} = \int d^2\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) v(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (3.31)$$

Напомним, что тут подразумеваются следующие обозначения. Во-первых, у «полевых» операторов имеются следующие индексы: спиновые $\sigma = \pm 1$; индексы подрешётки $\alpha = \{A, B\}$, и индексы долины $a = \{K, K'\}$. Матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma}$ действуют на индексы подрешётки α (поскольку они ведут себя почти как спин- $\frac{1}{2}$ — тоже две степени свободы, и описываются

матрицами Паули — эти степени свободы называют *псевдоспином*; не путайте его с физическим спином!); по спиновым индексам σ гамильтониан диагонален, и запись тут относится к долине K . Для полного описания, к этому члену нужно добавить также гамильтониан долины K' . Кроме того, стоит сделать следующие замечания:

- Во-первых, непрерывный предел брался согласно $a \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$, $S = NS_0 = \text{const}$; и поэтому периодические граничные условия для полей ψ по-прежнему имеют место. Говоря аккуратней, сумма $\frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{R}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ — даёт не одну дельта-функцию, а целую решётку⁶. В нашем случае это не так важно — поскольку интегрирование $\int d^2\mathbf{r}$ подразумеваются по лишь одному листу конечной площади, а не по всему двумерному пространству!
- Во-вторых, ещё раз обратим внимание, что «оператор импульса» $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$, стоящий в выражении гамильтониана, не является в нём настоящим квантомеханическим оператором, а является лишь удобным способом записи обычного оператора дифференцирования, действующего на аргумент полевого оператора $\hat{\psi}(\mathbf{r})$.
- В-третьих, мы имеем дело с вторично-квантованным гамильтонианом, полученным как непрерывный предел модели сильной связи. Достаточно очевидно, что вместо него можно перейти к обычной одночастичной задаче в формализме «первичного» квантования, описывающей единственный электрон, движущийся в графене. Соответствующий одночастичный гамильтониан будет иметь вид:

$$\hat{H}^{(K)} = v(\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}), \quad (3.32)$$

и в одночастичной задаче $\hat{\mathbf{p}}$ будет уже являться настоящим квантомеханическим оператором. Волновые функции, на которые будет действовать этот оператор, будут представлять собой псевдоспинор, т.к. будут иметь дополнительные индексы подрешётки и спина.

- В-четвёртых, не стоит забывать, что это описание — низкоэнергетическое, представляет собой разложение по параметру $pa \ll 1$, и в этой теории имеется ультрафиолетовая обрезка $\Lambda \sim 1/a$.

3.2 Фононы

3.2.1 Микроскопическая модель

Постановка задачи и модель

Из решения классической задачки о колебаниях атомов в одномерной решётке мы уже знаем множество свойств фононов. В частности, мы знаем о наличии акустических и оптических ветвей; последние отделены некоторой щелью в спектре $\omega_{opt}(\mathbf{k} = 0) = \omega_{opt} > 0$, и возникают только в случае наличия в элементарной ячейке более чем одного атома. Поскольку мы будем интересоваться низкоэнергетической физикой, то оптические ветви мы отбросим, и для простоты будем рассматривать модель с единственным атомом в элементарной ячейке.

Таким образом, пусть имеется трёхмерная кристаллическая решётка из N атомов с периодическими граничными условиями. Атомы мы будем нумеровать их положением в невозмущённой решётке \mathbf{r} , и их динамика определяется трёхмерными смещениями $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. В самом общем случае, потенциальная энергия является функцией всех компонент смещений всех атомов, то есть функцией $3N$ переменных вида $U \equiv U(\{\mathbf{u}(\mathbf{r})\})$. Считая смещения малыми, мы всегда можем записать:

$$U(\{\mathbf{u}(\mathbf{r})\}) \approx U(0) + \sum_{\mathbf{r}} \frac{\partial U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r})} u_{\alpha}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r}) \partial u_{\beta}(\mathbf{r}')} u_{\alpha}(\mathbf{r}) u_{\beta}(\mathbf{r}') + \dots \quad (3.33)$$

($\alpha, \beta = (x, y, z)$ — пространственные индексы, по ним происходит суммирование). Первый член — некоторая статическая константа, и на динамику решётки никакого влияния не оказывает. Второй член пропадает, поскольку кристалл при нулевых смещениях находится в равновесии, и $\frac{\partial U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r})} = 0$. Поэтому в ведущем — **гармоническом** — приближении остаётся лишь третий член. Введём следующее обозначение:

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\alpha}(\mathbf{r}) \partial u_{\beta}(\mathbf{r}')} \quad (3.34)$$

Полученный объект является тензором второго ранга (матрицей) по индексам α, β , и обладает следующими общими свойствами:

⁶В одномерье это носит название формулы суммирования Пуассона, и записывается следующим образом:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) \equiv \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i k x} dx \Leftrightarrow \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i k x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n)$$

На самом деле, это — ни что иное как соотношения полноты для Фурье-базиса на множестве периодических функций.

- Симметричность: $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U_{\beta\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$.
- Зеркальная симметрия кристалла приводит к тому, что $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$.
- Трансляционная инвариантность системы приводит к тому, что неважно какую пару атомов смещать — энергия зависит только от их относительного положения: $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv U_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
- Иным следствием трансляционной инвариантности является следующее утверждение: если все атомы сместить одновременно $u_\alpha(\mathbf{r}) \equiv u_\alpha$, то энергия измениться не должна. Из этого следует ещё одно общее свойство: $\sum_{\mathbf{r}'} U_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0$, что после преобразования Фурье означает $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k} = 0) = 0$.

Это позволяет нам написать следующий гамильтониан:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{\hat{p}_\alpha^2(\mathbf{r})}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} U_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{u}_\alpha(\mathbf{r}) \hat{u}_\beta(\mathbf{r}'), \quad [\hat{u}_\alpha(\mathbf{r}), \hat{p}_\beta(\mathbf{r}')] = i\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (3.35)$$

Нормальные координаты

Как всегда, для диагонализации такого гамильтониана необходимо избавиться от пространственной зависимости и ввести дискретное преобразование Фурье:

$$\hat{p}_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{u}_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.36)$$

$$\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{p}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{u}_\alpha(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.37)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что преобразование Фурье приводит к следующим коммутационным соотношениям для новых операторов:

$$[\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}, \hat{p}_{\alpha,\mathbf{q}}] = i\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (3.38)$$

Кроме того, в силу эрмитовости $\hat{u}_\alpha(\mathbf{r})$ и $\hat{p}_\alpha(\mathbf{r})$, имеется условие $\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}^\dagger = \hat{p}_{\alpha,-\mathbf{k}}$ и $\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}^\dagger = \hat{u}_{\alpha,-\mathbf{k}}$. Гамильтониан же приходит к следующему виду:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} \hat{p}_{\alpha,-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} \hat{u}_{\beta,-\mathbf{k}} \right) \quad (3.39)$$

где введено преобразование Фурье матрицы $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} U_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Можно вывести уравнения движения для новых переменных, коммутируя их с гамильтонианом:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}] = -U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\beta,\mathbf{k}} \\ \frac{d\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}] = \frac{1}{m} \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} \end{cases} \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} + \frac{1}{m} U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\beta,\mathbf{k}} = 0 \quad (3.40)$$

Для решения классических уравнений движения мы приходим к необходимости диагонализации матрицы $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. Это делается посредством введения тройки единичных собственных векторов поляризации $e_\beta^{(i)}(\mathbf{k})$ ($i = 1, 2, 3$) с собственными числами $m\omega_i^2(\mathbf{k})$:

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\beta^{(i)}(\mathbf{k}) = m\omega_i^2(\mathbf{k}) e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \quad (3.41)$$

Обсудим свойства матрицы и её собственных чисел, а также векторов поляризации.

- Как было сказано, $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k} = 0) = 0$ в силу трансляционной симметрии. Поэтому все три ветви $\omega_i(\mathbf{k} \rightarrow 0) = 0$.
- $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ положительно определена, поскольку мы имеем дело с устойчивым равновесием. Поэтому все $\omega_i(\mathbf{k})$ чисто вещественны.
- В силу вещественности энергии, $U_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) = U_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k})$. Кроме того, в силу зеркальной симметрии, $U_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) = U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$. Поэтому спектр симметричен $\omega_i(-\mathbf{k}) = \omega_i(\mathbf{k})$.
- Матрица $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ вещественна и симметрична, поэтому вектора поляризации тоже можно выбрать вещественными $e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \in \mathbb{R}^3$.
- Вектора поляризации ортонормированы $e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) e_\alpha^{(j)}(\mathbf{k}) = \delta_{ij}$ и образуют полную систему $\sum_i e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) e_\beta^{(i)}(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta}$.

- Они определены с точностью до выбора константы вида ± 1 (для произвольного \mathbf{k}). Удобно наложить дополнительное требование на них: $e_\alpha^{(i)}(-\mathbf{k}) = -e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k})$; дальше будет видно, что это соответствует гладкости $e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k})$ (в частности, для продольной поляризации они имеют вид $e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}}{k}$, что удовлетворяет этому свойству).

Проведём теперь разложение $p_{\alpha,\mathbf{k}}$ и $u_{\alpha,\mathbf{k}}$ по поляризациям:

$$\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} = \sum_i e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \hat{p}_{\mathbf{k},i}, \quad \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} = \sum_i e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \quad (3.42)$$

Тут стоит обратить внимание, что из-за наложенного условия на вектора поляризации, возникает несколько дополнительных минусов в разных соотношениях, включая следующие:

$$\hat{p}_{-\mathbf{k},i}^\dagger = \sum_\alpha e_\alpha^{(i)}(-\mathbf{k}) p_{\alpha,-\mathbf{k}}^\dagger = -\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \quad \hat{u}_{-\mathbf{k},i}^\dagger = -\hat{u}_{\mathbf{k},i} \quad (3.43)$$

$$[\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{-\mathbf{k}',j}] = e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) e_\beta^{(j)}(-\mathbf{k}') [u_{\alpha,\mathbf{k}}, \hat{p}_{\beta,-\mathbf{k}'}] = -i \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ij} \quad (3.44)$$

$$\hat{H} = - \sum_{\mathbf{k},i} \left(\frac{1}{2m} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \hat{p}_{-\mathbf{k},i} + \frac{1}{2} m \omega_i^2(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \hat{u}_{-\mathbf{k},i} \right) \quad (3.45)$$

(что, конечно, никак не противоречит положительной определённости гамильтониана). Наконец, всё это было сделано, чтобы диагонализировать уравнения движения, которые принимают следующий (осцилляторный) вид:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \hat{p}_{\mathbf{k},i} &= -m \omega_i^2(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \\ \frac{d}{dt} \hat{u}_{\mathbf{k},i} &= \frac{1}{m} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \end{cases} \quad (3.46)$$

Правильный способ выбрать *нормальные координаты* — которые соответствуют лестничным операторам $\hat{a}_{\mathbf{k},i}$ и $\hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger$ — это составить линейные комбинации операторов $\hat{p}_{\mathbf{k},i}$ и $\hat{u}_{\mathbf{k},i}$ (поскольку уравнения движения не «перемешивают» \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$, то этого будет достаточно), для которых уравнения расцепятся, а коммутационные соотношения будут каноническими $[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{k}',j}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ij}$. Несложно видеть, что они имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \hat{a}_{\mathbf{k},i} &= \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} \left(\hat{u}_{\mathbf{k},i} + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \right) \\ \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} \left(-\hat{u}_{-\mathbf{k},i} + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} \hat{p}_{-\mathbf{k},i} \right) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \hat{u}_{\mathbf{k},i} &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega_i(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} - \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) \\ \hat{p}_{\mathbf{k},i} &= \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} (-i) (\hat{a}_{\mathbf{k},i} + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) \end{cases} \quad (3.47)$$

Непосредственной проверкой убеждаемся, что коммутационные соотношения канонические:

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{q},j}^\dagger] = \frac{m\sqrt{\omega_i(\mathbf{k})\omega_j(\mathbf{q})}}{2} \left(\frac{i}{m\omega_j(\mathbf{q})} [\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{-\mathbf{q},j}] - \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} [\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \hat{u}_{-\mathbf{q},j}] \right) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{ij} \quad (3.48)$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{q},j}] = \frac{m\sqrt{\omega_i(\mathbf{k})\omega_j(\mathbf{q})}}{2} \left(\frac{i}{m\omega_j(\mathbf{k})} [\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{\mathbf{q},j}] + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} [\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \hat{u}_{\mathbf{q},j}] \right) = 0 \quad (3.49)$$

И, наконец, подстановкой в гамильтониан убеждаемся, что он становится диагональным:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= - \sum_{\mathbf{k},i} \left(-\frac{1}{2m} \cdot \frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) (\hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger) + \frac{1}{2} m \omega_i^2(\mathbf{k}) \cdot \frac{1}{2m\omega_i(\mathbf{k})} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} - \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) (\hat{a}_{-\mathbf{k},i} - \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger) \right) = \\ &= \sum_{\mathbf{k},i} \frac{1}{4} \omega_i(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i} \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i} \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger \right) = \boxed{\sum_{\mathbf{k},i} \omega_i(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},i} + \frac{1}{2} \right)} \quad (3.50) \end{aligned}$$

Приведём для справки окончательный ответ в виде разложения операторов смещения через вектора поляризации и операторы, диагонализующие гамильтониан (а также введя плотность кристалла $\rho \equiv mN/V$):

$$\begin{cases} \hat{u}_\alpha(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},i} \frac{e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k})}{\sqrt{2\rho\omega_i(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} e^{-i\omega_i(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger e^{i\omega_i(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \\ \hat{p}_\alpha(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},i} e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \sqrt{\frac{\rho\omega_i(\mathbf{k})}{2}} (-i) (\hat{a}_{\mathbf{k},i} e^{-i\omega_i(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger e^{i\omega_i(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \end{cases} \quad (3.51)$$

Продольные и поперечные моды

Тем самым, в законе дисперсии фононов имеется три ветви $\omega_i(\mathbf{k})$; и различные фононы характеризуются различными поляризациями $e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k})$. При малых векторах \mathbf{k} (а именно длинноволновым пределом мы будем интересоваться) — на больших масштабах, когда решётка уже не играет никакой роли — имеет место следующее разложение, параметризуемое парой чисел⁷ μ и λ :

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = V_0((\lambda + \mu)k_\alpha k_\beta + \mu k^2 \delta_{\alpha\beta}), \quad ka \ll 1 \quad (3.52)$$

(других тензоров составить нельзя; величина V_0 определяет объем элементарной ячейки). Можно показать, что определённые таким образом коэффициенты λ и μ являются термодинамическими величинами и называются **модулями упругости**⁸. Такую матрицу можно явно диагонализировать, заметив, что $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \cdot k_\beta = V_0(\mu k^2 + \frac{1}{2}\lambda k^2)k_\alpha$. Первая мода тем самым «параллельна» \mathbf{k} :

$$e_\alpha^{(l)}(\mathbf{k}) \equiv \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad \omega_l^2(\mathbf{k}) = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} k^2 \equiv c_l^2 k^2, \quad c_l^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} \quad (3.53)$$

(обратим внимание, что введённый таким образом вектор обладает требуемым ранее свойством $e_\alpha^{(l)}(-\mathbf{k}) = e_\alpha^{(l)}(\mathbf{k})$; а величина $\rho = \frac{m}{V_0}$ даёт обычную плотность кристалла). Величина c_l определяет **скорость продольного звука**, а сама мода называется **продольной (longitudinal)**. По аналогии, если мы теперь рассмотрим пару векторов $e_\alpha^{(t,1/2)} \perp \mathbf{k}$, то:

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})e_\beta^{(t,1/2)} = V_0\mu k^2 e_\alpha^{(t,1/2)} \Rightarrow \omega_t^2(\mathbf{k}) = \frac{\mu}{\rho} k^2 \equiv c_t^2 k^2, \quad c_t^2 = \frac{\mu}{\rho} \quad (3.54)$$

Соответственно, мы имеем дело с парой совпадающих ветвей **поперечного звука (transversal)**. Мы видим, что продольная скорость звука всегда больше.

В кристаллах с имеющимся выделенным направлением предположение об отсутствии важности кристаллической решётки на больших масштабах может нарушаться — из-за чего величина $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ уже не будет являться тензором на малых \mathbf{k} ; как следствие, в случае общего положения мы будем иметь три различные моды, которые, вообще говоря, не будут являться ни продольными, ни поперечными, а какими-то их линейными комбинациями.

3.2.2 Макроскопическая модель

Вместо разработанной тут микроскопической теории, можно было бы стартовать сразу с полевого описания, известного из теории упругости⁹. В рамках теории упругости, кристалл рассматривается как непрерывный объект, который характеризуется полем смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ (полный аналог микроскопии). Кинетический вклад в упругую энергию тем самым имеет следующий вид:

$$T = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \rho \dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r}) \quad (3.55)$$

Потенциальная энергия связана с деформациями, и при однородном смещении $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \text{const}$ она не возникает. Поэтому вводится **тензор деформации** $u_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\partial_\alpha u_\beta(\mathbf{r}) + \partial_\beta u_\alpha(\mathbf{r}))$, и потенциальная энергия в общем случае записывается через него. Её можно связать с различными модулями упругости; в частности, в терминах введённых выше коэффициента Ламэ λ и модуля сдвига μ она имеет наиболее простой вид:

$$\Pi = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (\lambda u_\gamma^\gamma + 2\mu u_{\alpha\beta}^2) \equiv \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [(\lambda + \mu)(\partial_\gamma u_\gamma)^2 + \mu(\partial_\alpha u_\beta)^2] \quad (3.56)$$

(сравните с разложением $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$). Тем самым, можно рассмотреть теорию поля с действием $S[\mathbf{u}(\mathbf{r})] = T - \Pi$, и проквантовать её. В качестве промежуточного действия, выпишем уравнения движения для $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ (которые будут такими же и в операторном формализме):

$$\rho \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) - (\lambda + \mu) \text{graddiv} \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} = 0 \quad (3.57)$$

⁷Такое разложение работает для кристаллов без выделенного направления — сферически симметричных кристаллов. В частности, оно не работает для одноосных и двуосных кристаллов

⁸Вообще говоря, различных модулей упругости имеется огромное количество, и с частью из них вы уже должны были быть знакомы из курса общей физики. Примеры модулей: модуль Юнга E , или модуль всестороннего сжатия K , или коэффициент Пуассона σ . Все эти модули упругости выражаются через любые два; в качестве пары основных мы выберем так называемый второй коэффициент Ламэ λ и модуль сдвига μ .

⁹Подробнее о таком подходе прочитать в Ландау и Лифшиц (2003, глава 1 «основные уравнения теории упругости», §4 «Закон Гука»)

Произвольное векторное поле $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ можно разложить на продольную часть $\mathbf{u}_l(\mathbf{r})$, которая характеризуется тем, что $\text{rot}\mathbf{u}_l(\mathbf{r}) = 0$, и поперечную часть $\mathbf{u}_t(\mathbf{r})$, которая характеризуется тем, что $\text{div}\mathbf{u}_t(\mathbf{r}) = 0$. Это утверждение можно видеть хотя бы потому, что в Фурье такое разложение можно непосредственно предъявить:

$$\mathbf{u}_{k,l} = \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_k)\mathbf{k}}{k^2} \Rightarrow \mathbf{k} \times \mathbf{u}_{k,l} = 0, \quad \mathbf{u}_{k,t} \equiv \mathbf{u}_k - \mathbf{u}_{k,l} \Rightarrow \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{k,t} = 0 \quad (3.58)$$

Рассматривая такое разложение, и беря ротор и дивергенцию такого уравнения, мы приходим к следующей паре волновых уравнений:

$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{u}}_l(\mathbf{r}) - c_l^2 \Delta \mathbf{u}_l = 0 & \left\{ c_l^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} \right. \\ \ddot{\mathbf{u}}_t(\mathbf{r}) - c_t^2 \Delta \mathbf{u}_t = 0 & \left. c_t^2 = \frac{\mu}{\rho} \right. \end{cases} \quad (3.59)$$

Эта пара уравнений показывает, что продольные и поперечные компоненты поля \mathbf{u} подчиняются волновым уравнениям с различными групповыми скоростями — это и есть наши продольные и поперечные фононы. Построенная тут теория полностью эквивалентна выведенной выше микроскопической.

3.2.3 Деформационный потенциал и электрон-фононное взаимодействие

Рассмотрим металл. В кристаллических веществах, электроны движутся в коллективном периодическом потенциале, создаваемом атомами и имеющим, как правило, Кулоновскую природу. Фононы представляют собой смещение атомов из их положения равновесия; и поскольку электроны гораздо легче атомов, то для описания такой системы хорошо работает адиабатическое приближение, в рамках которого нужно научиться решать задачу о движении электронов в статическом потенциале, создаваемом **неподвижными**, но произвольным образом смещёнными атомами. Тем самым, достаточно очевидно, что электроны и фононы в таких системах взаимодействуют, и в гамильтониан должен быть эффективный вклад, который зависит как от электронных степеней свободы $\hat{\psi}(\mathbf{r})$, так и от фононных $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$.

Выберем следующую модель взаимодействия. Пусть потенциал отдельного иона имеет вид $U_0(\mathbf{r})$ (скажем, это Кулоновский потенциал $U_0(\mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{r}$, где $Z \sim 1$, так как в зону проводимости уходит лишь один или небольшое число электронов). Тогда коллективный потенциал можно представить в виде $V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Если теперь атом \mathbf{r}' сместился на малое расстояние $\mathbf{u}(\mathbf{r}')$, то поправку к потенциалу, в котором движутся электроны, можно записать в следующем виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \delta V(\mathbf{r}), \quad \delta V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} u_\alpha(\mathbf{r}') \partial_\alpha U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \int \frac{d\mathbf{r}'}{V_0} u_\alpha(\mathbf{r}') \partial_\alpha U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d\mathbf{r}'}{V_0} \partial_\alpha u_\alpha(\mathbf{r}') U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.60)$$

(в последнем тождестве мы проинтегрировали по частям). Мы имеем дело со свёрткой; преобразование Фурье имеет вид: $\delta V_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V_0} i k_\alpha u_{\alpha,\mathbf{k}} U_0(\mathbf{k})$. На малых импульсах (имея дело с эффективной теорией поля, мы всегда подразумеваем низкоэнергетическое разложение!) ядро Кулоновского взаимодействия $U_0(\mathbf{k}) = \frac{4\pi Ze^2}{k^2}$ сильно сингулярно. Причина этой сингулярности — в дальнедействующей природе Кулоновского взаимодействия.

В действительности же это не так — дело в том, что, как и в плазме — в электронном газе имеет место экранировка. Свободные электроны перераспределяются, создавая дополнительную зарядовую плотность $-\epsilon \delta n(\mathbf{r})$, в результате чего реальный потенциал взаимодействия электронов с ионами изменяется с $U_0(\mathbf{r})$ на некоторый другой $U(\mathbf{r})$; последний оказывается короткодействующим, с типичным радиусом в несколько ангстрем.

Экранировка Томаса-Ферми Можно предложить достаточно простые рассуждения, которые позволяют вывести асимптотику экранированного потенциала взаимодействия $U(\mathbf{r})$ на больших расстояниях. Ключевым тут является предположение о том, что если потенциал достаточно плавный (меняется на масштабах сильно больших, чем обратный импульс Ферми — он задаёт типичное расстояние между электронами), то его можно трактовать как просто локальную *постоянную* поправку к энергии. Поэтому можно сказать, что локальная функция распределения фермионов — ферми-ступенька, имеющая при нуле температур вид $n_F(E) \approx \theta(E_F - E)$ (E_F — энергия Ферми, θ — функция Хевисайда), заменяется на $n_F(E + U(\mathbf{r}))$. Это в свою очередь приводит к локальной изменению концентрации электронов:

$$\delta n(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [n_F(E_{\mathbf{p}} + U(\mathbf{r})) - n_F(E_{\mathbf{p}})] \approx U(\mathbf{r}) \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\partial n_F}{\partial E} \approx -U(\mathbf{r}) \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \delta(E_F - E_{\mathbf{p}}) \equiv -\nu U(\mathbf{r}) \quad (3.61)$$

Последнее просто по определению задаёт *плотность одночастичных состояний на уровне Ферми* $\nu(E_F)$; это является одной из самых важных характеристик Ферми-газа и металла в целом. Поправка к концентрации приводит к возникновению электростатического потенциала, который удовлетворяет уравнению Лапласа:

$$\nabla^2 \phi = -4\pi e \delta n(\mathbf{r}) \Rightarrow \phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e}{k^2} \delta n_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi \nu e}{k^2} U_{\mathbf{k}} \quad (3.62)$$

Наконец, полный потенциал $U(\mathbf{r})$ самосогласованным образом определяется как сумма $U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r})$. Таким образом, мы приходим к уравнению согласования, которое определяет экранированное взаимодействие $U(\mathbf{r})$, а точнее — его Фурье-образ:

$$U_{\mathbf{k}} = U_{0,\mathbf{k}} - \frac{4\pi\nu e^2}{k^2} U_{\mathbf{k}} \Rightarrow U_{\mathbf{k}} = \frac{k^2 U_{0,\mathbf{k}}}{k^2 + 4\pi\nu e^2} = \frac{4\pi Z e^2}{k^2 + 4\pi\nu e^2} \quad (3.63)$$

Это уравнение эквивалентно экранировке Дебая в плазме. Масштаб экранировки даётся выражением $\frac{1}{\sqrt{4\pi\nu e^2}}$; наконец, на малых импульсах это выражение выходит на универсальную константу $U_{\mathbf{k}=0} = \frac{Z}{\nu}$; эффективно это означает, что с точки зрения больших масштабов взаимодействие можно заменить на дельта-функциональное $U(\mathbf{r}) \approx \frac{Z}{\nu} \delta(\mathbf{r})$. Это позволяет записать модельный гамильтониан электрон-фононного взаимодействия в следующем виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = \frac{Z}{\nu V_0} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \operatorname{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) \quad (3.64)$$

Взаимодействие такого вида носит название *деформационного потенциала*. Это — не единственный способ описание электрон-фононного взаимодействия, а всего лишь одна из моделей. Стоит обратить внимание на несколько важных деталей.

- В металлах, как правило, концентрация электронов сама имеет порядок $n \sim \frac{1}{V_0}$, а плотность состояний — $\nu \sim \frac{n}{E_F}$. Поэтому префактор имеет характерный порядок $\sim E_F$. Типичное значение кинетической энергии электронов — тоже имеет порядок E_F . Поэтому такое взаимодействие, наивно, *не содержит малого параметра* (хотя в дальнейшем подразумевается применение теории возмущений по \hat{H}_{e-ph}). В действительности же такой малый параметр будет иметься — это параметр адиабатичности, отношение энергии Дебая к энергии Ферми ω_D/E_F ; это примерно то же самое, что и отношение скорости звука к скорости Ферми $\sim c/v_F$, которое, в свою очередь связано с отношением масс электрона и иона как $\sim \sqrt{m/M}$.
- Взаимодействие происходит только с продольными фононами (это утверждение, конечно, не абсолютно точное, но в главном порядке это действительно так); поэтому поперечные фононы можно вообще не рассматривать.
- Величина $\operatorname{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$ совпадает локальное относительное изменение объема $\frac{\delta V}{V}$. Кроме того, все характеристики Кулоновского взаимодействия — в частности, заряд электрона — полностью выпали из гамильтониана, хотя взаимодействие и имеет Кулоновскую природу.

Последнее замечание неспроста. Имеется ещё один элементарный механизм электрон-фононного взаимодействия, который приводит к сходному результату. Дело в том, что если происходит локальное сжатие на величину $\frac{\delta V}{V}$, то это эквивалентно локальному изменению плотности электронов $\delta n = n \frac{\delta V}{V} = n \operatorname{div} \hat{\mathbf{u}}$. Это изменение, в свою очередь, приводит к локальному повышению химического потенциала — энергии Ферми — на величину $\delta\mu = \frac{\partial E_F}{\partial n} \delta n \equiv \frac{n}{\nu} \operatorname{div} \hat{\mathbf{u}}$ (ν — опять-таки совпадает с плотностью состояний на уровне Ферми). Поскольку электроны — быстрая подсистема, то они приходят в равновесие гораздо быстрее фононов; в частности, они быстро перераспределяются так, чтобы полный электрохимический потенциал был постоянным по всей системе. Перераспределение электронной плотности создаёт электрический потенциал, который как раз представляет собой эффективное электрон-фононное взаимодействие, и который компенсирует изменение химического потенциала. Это позволяет записать гамильтониан в следующем виде:

$$\hat{H}_{e-ph} = \frac{gn}{\nu} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \operatorname{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) \quad (3.65)$$

(величина $g \sim 1$ — безразмерный параметр электрон-фононного взаимодействия, вводимый феноменологически). Внешне этот гамильтониан устроен так-же (с учётом $n \sim \frac{1}{V_0}$), хотя и имеет немного другую природу. В дальнейшем мы будем пользоваться именно таким видом гамильтониана, и считать параметр $g \ll 1$, устраивая теорию возмущений по этому параметру.

Замечание (литература) В Левитов и Шитов (2003), разложение поля $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$ имеет буквально такой же вид, как и в формуле (3.51) (с учётом того, что плотность кристалла связана с объемом элементарной ячейки согласно $\rho = \frac{m}{V_0}$, и $V = NV_0$). Электрон-фононное взаимодействие выражается через поле

$$\hat{\varphi}(\mathbf{r}) = c\sqrt{\rho} \operatorname{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\omega(\mathbf{k})}{2}} \cdot i(\hat{a}_{\mathbf{k},||} e^{-i\omega(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},||}^\dagger e^{i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad \omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}| \quad (3.66)$$

Гамильтониан взаимодействия в таком случае выражается согласно $\hat{H}_{e-ph} = \frac{gn}{\nu c\sqrt{\rho}} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\varphi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r})$; поэтому константа связи у нас и у ЛШ связаны соотношением $g_{\text{ЛШ}} = \frac{n}{\nu c\sqrt{\rho}} g$. Наконец, ЛШ вводит безразмерную константу ζ согласно

соотношению $\zeta = g_{\text{ЛШ}}^2 \nu_0$; это соответствует определению в наших терминах $\zeta = \frac{n^2 g^2}{\nu \rho c^2}$. Эта константа находится из следующим соотношений $\nu = \frac{mp_F}{2\pi^2}$, $n = \frac{p_F^3}{3\pi^2}$; тем самым:

$$\zeta = \frac{g^2}{3\pi^2} \cdot \frac{mp_F^3}{\rho} \cdot \frac{v_F^2}{c^2} \sim 1 \cdot \frac{m}{M} \cdot \frac{M}{m} \sim 1 \quad (3.67)$$

Глава 4

Фейнмановская диаграммная техника

4.1 Функции Грина

4.1.1 Двухточечные корреляционные функции

Как мы выяснили на различных примерах, решение физических задач с помощью методов квантовой теории поля сводится к вычислению различных **корреляционных функций** — вакуумных средних от полевых операторов (или операторов рождения и уничтожения, которые с ними линейно связаны). Для демонстрации ключевых объектов, которые при этом возникают, вернёмся к вещественной теории Клейна-Гордона. Мы будем интересоваться корреляторами вида $\langle 0 | \hat{\phi}(x_1) \hat{\phi}(x_2) \dots | 0 \rangle$.

Систематический способ вычисления таких корреляционных функций следующий. Полевые операторы можно представить в виде $\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}^{(+)}(x) + \hat{\phi}^{(-)}(x)$, где $\hat{\phi}^{(+)}(x)$ содержит только операторы рождения $\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}$, а $\hat{\phi}^{(-)}(x)$ — содержащую только операторы уничтожения $\hat{a}_{\mathbf{p}}$; поэтому про них известно следующее:

$$\hat{\phi}^{(-)}(x) | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{\phi}^{(+)}(x) \equiv 0 \quad (4.1)$$

После разбиения, достаточно использовать коммутационные соотношения и тот факт, что $[\hat{\phi}^{(+)}(x_1), \hat{\phi}^{(-)}(x_2)]$ — это уже не оператор, а число, и «протащить» все $\hat{\phi}^{(-)}$ «направо», а $\hat{\phi}^{(+)}$ — «налево»¹, после чего их действие мы знаем — тождественный ноль. Все члены, которые при этом по пути «выпадут» за счёт коммутаторов, и дадут ответ. В качестве демонстрации, посчитаем таким способом самую тривиальную двухточечную корреляционную функцию:

$$\begin{aligned} D(x-y) &\equiv \langle 0 | \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) | 0 \rangle = \langle 0 | (\hat{\phi}^{(+)}(x) + \hat{\phi}^{(-)}(x)) (\hat{\phi}^{(+)}(y) + \hat{\phi}^{(-)}(y)) | 0 \rangle = \langle \hat{\phi}^{(-)}(x) \hat{\phi}^{(+)}(y) \rangle = \\ &= \langle 0 | [\hat{\phi}^{(-)}(x), \hat{\phi}^{(+)}(y)] + \hat{\phi}^{(+)}(y) \hat{\phi}^{(-)}(x) | 0 \rangle = [\hat{\phi}^{(-)}(x), \hat{\phi}^{(+)}(y)] \quad (4.2) \end{aligned}$$

Последнее считается тривиально, используя разложение полевых операторов по лестничным:

$$\hat{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} e^{ipx}) \quad (4.3)$$

$$D(x-y) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} e^{-ip(x-y)} = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3 2E_{\mathbf{p}}} e^{-ip(x-y)} \quad (4.4)$$

Обратим внимание, что этот объект лоренц-инвариантен, поскольку таковой является «мера» $\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3 2E_{\mathbf{p}}}$; напомним, что мы используем обозначения, в которых в экспоненте стоит произведение четырёх-векторов: $p(x-y) \equiv p_{\mu}(x-y)^{\mu} = E_{\mathbf{p}}(x^0-y^0) - \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}-\mathbf{y})$; в частности, эта корреляционная функция может зависеть только от интервала $s^2 = (x-y)^2 = (x^0-y^0)^2 - (\mathbf{x}-\mathbf{y})^2$.

¹Говорят — «нормально упорядочить» выражение. Само выражение, в котором все операторы уничтожения стоят справа, а рождения — слева, называют *нормально упорядоченным*

4.1.2 Свойства причинности и запаздывающий пропагатор

Гораздо более интересным объектом является коммутатор полей в двух точках x и y . Из курса квантовой механики известно, что если два эрмитовых оператора коммутируют, то у них имеется общий базис; более того, это значит, что акт взаимодействия («измерения» поля) в одной точке никак не может повлиять на результат взаимодействия с таким полем (его измерение) в другой такой точке. Коммутатор отражает свойства **причинности** теории поля.

Поскольку полевые операторы — линейны по операторам рождения и уничтожения, то коммутатор — просто число. Тем самым, можно свести задачу к предыдущей:

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] = \langle 0 | \hat{\phi}(x)\hat{\phi}(y) - \hat{\phi}(y)\hat{\phi}(x) | 0 \rangle = D(x-y) - D(y-x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3 2E_{\mathbf{p}}} (e^{-ip(x-y)} - e^{ip(x-y)}) \quad (4.5)$$

Для исследования полученного результата можно воспользоваться следующим соображением. Пусть x и y связаны пространственно-подобным интервалом, так что $s^2 = (x-y)^2 = -\mathbf{r}^2 < 0$. Это означает, что в выражении можно совершить буст — преобразование Лоренца, перемешивающее энергию $E_{\mathbf{p}}$ и импульс \mathbf{p} — который уберёт нулевую компоненту скалярного произведения, и в экспоненте будет стоять $p(x-y) = -\mathbf{p}\mathbf{r}^2$. Полученный интеграл нечетён по импульсу, и тем самым зануляется. Если же они связаны временно-подобным интервалом, то есть $s^2 = t^2 > 0$, то подобный трюк позволит привести выражение к виду $p(x-y) = E_{\mathbf{p}}t$; в результате чего под интегралом будет стоять вполне конечное ненулевое выражение. Таким образом, принцип причинности, гласящий, что события могут быть связаны причинной связью только если интервал между ними време-подобен, выполняется и в квантовой теории поля.

В соответствии с этим, одним из самых важных объектов в квантовой теории поля является так называемая *запаздывающая функция Грина* (иногда её называют *причинной*), которая определяется с дополнительной функцией Хевисайда, роль которой будет раскрыта позже:

$$D_R(x-y) \equiv \theta(x^0 - y^0) \langle 0 | [\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] | 0 \rangle \quad (4.6)$$

Для выяснения её смысла, вычислим сперва её преобразование Фурье:

$$D_R(\omega, \mathbf{p}) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3 2E_{\mathbf{q}}} (e^{-iE_{\mathbf{q}}t + i\mathbf{q}\mathbf{r}} - e^{iE_{\mathbf{q}}t - i\mathbf{q}\mathbf{r}}) \quad (4.7)$$

Интеграл по координате снимается согласно $\int d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p})$. Формально, конечно, интегралы по времени расходятся, и для придания им смысла их нужно регуляризовать следующим образом:

$$\int_0^\infty e^{i\omega t} dt \equiv \lim_{\text{def } \epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{i\omega t - \epsilon t} dt = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\omega + i\epsilon} \equiv \frac{i}{\omega + i0} \quad (4.8)$$

Обратим внимание, что такой способ регуляризации даёт выражение, совместное с правилом обхода полюсов при взятии обратного преобразования Фурье, используя методы ТФКП. Другим способом воспринимать эту инфинитезимальную добавку — это в используя формулу Сохоцкого, согласно которой $\frac{1}{\omega + i0} = \mathcal{P}\frac{1}{\omega} - i\pi\delta(\omega)$. Используя эти правила, мы приходим к следующему результату:

$$D_R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \left(\frac{i}{\omega - E_{\mathbf{p}} + i0} - \frac{i}{\omega + E_{\mathbf{p}} + i0} \right) = \boxed{\frac{i}{(\omega + i0)^2 - E_{\mathbf{p}}^2} = \frac{i}{p^2 - m^2}}, \quad (4.9)$$

где последний знак равенства нужно понимать символически, не забывая о правиле обхода полюсов при вычислении интегралов по ω — полюса $\omega = \pm E_{\mathbf{p}} - i0$ обходятся сверху особенностей. Наконец, последнее же равенство в действительности означает, что запаздывающая функция Грина удовлетворяет следующему уравнению:

$$\boxed{(-\partial^2 - m^2)D_R(x) = i\delta^{(4)}(x)}, \quad (4.10)$$

то есть с точностью до множителя³ i она совпадает с **запаздывающей функцией Грина** классического уравнения Клейна-Гордона! В действительности же, это самое общее свойство — такого рода выражения работают в самых разных теориях поля.

²На самом деле, конечно, даже к виду $-p_z|\mathbf{r}|$

³В cond-mat запаздывающую функцию Грина часто вводят с дополнительным множителем $-i$, как раз чтобы в уравнении никаких множителей не было

4.1.3 Фейнмановский пропагатор

При построении теории возмущений естественным образом возникает такой объект, как Т-упорядочение (оно же *хронологическое упорядочение*, или *временное упорядочение*). Этот объект определяется как формальный символ, применяемый к набору операторов в Гейзенберговском представлении, и упорядочивающий их по убыванию времён:

$$\hat{T}\{\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\} = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2), & t_1 > t_2 \\ \pm\hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1), & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (4.11)$$

(для бозе-статистики в нижнем знаке равенства ставится «+», для ферми — если операторы \hat{A} и \hat{B} антикоммутируют — «-»). Через него определяется и самый важный объект для квантовой теории поля и диаграмной техники — это *фейнмановская функция Грина* (которую, так же как и запаздывающую, тоже часто называют *причинной*):

$$D_F(x-y) = \langle 0 | \hat{T} \{ \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) \} | 0 \rangle \quad (4.12)$$

Для вычисления её Фурье-образа можно явно раскрыть символ временного упорядочения используя функции Хевисайда $D_F(x-y) \equiv \theta(x^0-y^0)D(x-y) + \theta(y^0-x^0)D(y-x)$; дальнейшее вычисление абсолютно аналогично и прямолинейно:

$$D_F(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \left(\int_0^\infty dt e^{i\omega t} e^{-iE_{\mathbf{p}}t} + \int_{-\infty}^0 dt e^{i\omega t} e^{iE_{\mathbf{p}}t} \right) = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \left(\frac{i}{\omega - E_{\mathbf{p}} + i0} - \frac{i}{\omega + E_{\mathbf{p}} - i0} \right) = \boxed{\frac{i}{\omega^2 - (E_{\mathbf{p}} - i0)^2} = \frac{i}{p^2 - m^2 + i0}} \quad (4.13)$$

Полученный объект уже не обладает свойствами причинности, как запаздывающая функция Грина — в частности, он отличен от нуля во всём пространстве (хотя вне светового конуса — для пространственно-подобных интервалов — он экспоненциально затухает). От запаздывающей функции Грина его отличает только правило обхода полюсов — расположение инфинитезимальной мнимой добавки $i0$ — которое говорит нам о том, что полюса по ω расположены в точках $\omega = \pm \sqrt{E_{\mathbf{p}}^2 - i0} = \pm(E_{\mathbf{p}} - i0)$ — поэтому полюс $-E_{\mathbf{p}}$ нужно обходить снизу, а полюс $+E_{\mathbf{p}}$ — сверху. Несложно видеть, что полученный объект тоже является функцией Грина классического уравнения Клейна-Гордона:

$$(-\partial^2 - m^2)D_F(x) = i\delta^{(4)}(x) \quad (4.14)$$

4.1.4 Старшие корреляционные функции

Выше мы обсудили вопрос вычисления, вообще говоря, любых вакуумных средних, и продемонстрировали метод на примере двухточечной корреляционной функции $D(x-y)$. Для, скажем, четырёхточечной корреляционной функции можно применить этот способ непосредственно, что представляет собой, однако, достаточно объёмное вычисление. К счастью, такую процедуру можно провести в самом общем виде⁴ — и в конечном итоге получить рецепт, который носит название **теоремы Вика**.

Рецепт следующий: нужно рассмотреть все возможные различные **спаривания** — разбиения полей на пары — и каждому спариванию поставить в соответствие произведение двухточечных корреляторов, составленных из спаренных полей; полученный результат просуммировать по всевозможным спариваниям⁵. Продемонстрируем это на примере четырёхточечной корреляционной функции:

$$\langle \hat{\phi}_1 \hat{\phi}_2 \hat{\phi}_3 \hat{\phi}_4 \rangle = \langle \hat{\phi}_1 \hat{\phi}_2 \rangle \langle \hat{\phi}_3 \hat{\phi}_4 \rangle + \langle \hat{\phi}_1 \hat{\phi}_3 \rangle \langle \hat{\phi}_2 \hat{\phi}_4 \rangle + \langle \hat{\phi}_1 \hat{\phi}_4 \rangle \langle \hat{\phi}_2 \hat{\phi}_3 \rangle \quad (4.15)$$

Приведём сразу несколько важных уточнений.

1. Теорема Вика работает в применении не к усреднению по произвольному состоянию, а только к вакууму $|0\rangle$.
2. Она работает для произвольных линейных комбинаций операторов рождения и уничтожения (полевые операторы являются лишь частным случаем). В частности, вместо полевых операторов там могут стоять сами операторы рождения и уничтожения.

⁴Это проделано в книге Пескин и Шрёдер (2001, глава 4.3 «Теорема Вика»)

⁵Для нечётного числа полей ответ — ноль (что очевидно, поскольку членов с одинаковым количеством операторов \hat{a} и \hat{a}^\dagger не будут — а только они дают вклад в ответ). Для чётного числа полей $(2N)$ несложная комбинаторика подсказывает, что общее количество спариваний — $(2N)!/2^N N!$.

3. Немаловажно, теорему Вика можно тривиально модифицировать для случая T -упорядоченных средних: а именно, в правой части достаточно брать Фейнмановские корреляторы. Это несложно понять исходя из того, что T -упорядочение является лишь формальным символом; теорему Вика можно применить и после, собственно, упорядочения.

Фермионы

Для фермионов теорема Вика тоже работает, но с небольшими поправками:

1. Усреднение может происходить не только по вакууму $|0\rangle$, а и по произвольному Слетеровскому детерминанту (или, что эквивалентно, волновой функции в представлении чисел заполнения — но не их линейной комбинации!). Для этого достаточно заметить, что для состояний с числами заполнения $n_k = 1$ можно поменять местами операторы рождения и уничтожения (перейти от *частичного* к *дырочному* представлению) — ввести $\hat{a}' = \hat{a}^\dagger$ и $\hat{a}'^\dagger = \hat{a}$, так что числа заполнения станут нулевыми $\hat{n}' = \hat{a}'^\dagger \hat{a}' = \hat{a} \hat{a}^\dagger = 1 - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1 - \hat{n}$; а состояние в новом представлении станет вакуумом $|0\rangle$.
2. Поскольку фермионные операторы антикоммутируют, то при замене $\hat{\psi}^{(-)}\hat{\psi}^{(+)} = \{\hat{\psi}^{(-)}, \hat{\psi}^{(+)}\} - \hat{\psi}^{(+)}\hat{\psi}^{(-)}$ перед некоторыми членами будет возникать знак «минус». В действительности же, перед каждым членом стоит дополнительный фактор $(-1)^P$ — знак соответствующей *перестановки*. Тут P — число перестановок, которые необходимо совершить, чтобы привести операторы к такому порядку, что «спаренные» операторы окажутся рядом в том же порядке. В частности, для четырёхточечного коррелятора изменился бы знак перед вторым членом:

$$\langle \hat{\psi}_1 \hat{\psi}_2 \hat{\psi}_3 \hat{\psi}_4 \rangle_{Fermi} = \langle \hat{\psi}_1 \hat{\psi}_2 \rangle \langle \hat{\psi}_3 \hat{\psi}_4 \rangle - \langle \hat{\psi}_1 \hat{\psi}_3 \rangle \langle \hat{\psi}_2 \hat{\psi}_4 \rangle + \langle \hat{\psi}_1 \hat{\psi}_4 \rangle \langle \hat{\psi}_2 \hat{\psi}_3 \rangle \quad (4.16)$$

3. Такое определение согласовано с выбором знака « \leftarrow » в определении T -упорядочения, поэтому теорема Вика не требует никаких модификаций для случая T -упорядоченных корреляторов.

4.2 Теория возмущений

4.2.1 Теория возмущений

Постановка задачи

Мы с вами научились решать точно решать различные задачи, описываемые гауссовыми (квадратичными) теориями поля. Теперь давайте изучим вопрос о том, как исследовать взаимодействующие теории поля — теории поля, у которых в гамильтониане имеются вершины старших порядков. Сделаем это на примере теории «фи-в-четвёртой» — теории Клейна-Гордона с дополнительной поправкой:

$$S_{int} = -\frac{\lambda}{4!} \int d^4x \phi^4(x), \quad \hat{V}_{int} = \frac{\lambda}{4!} \int d^3\mathbf{x} \cdot \hat{\phi}^4(\mathbf{x}) \quad (4.17)$$

Величина, которую мы хотим вычислить — это Фейнмановская функция Грина, которая для взаимодействующей теории определяется аналогично как среднее, но уже не по вакууму $|0\rangle$ — а по настоящему основному состоянию взаимодействующей теории $|\Omega\rangle$:

$$D_F(x-y) \equiv \langle \Omega | T \{ \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) \} | \Omega \rangle \quad (4.18)$$

которая в свободной теории имела вид $D_F(p) = \frac{i}{p^2 - m^2 + i0}$. Взаимодействие мы будем учитывать в рамках теории возмущений, что в конечном итоге приведёт нас к диаграммной технике Фейнмана.

Получение основного состояния

Первый нетривиальный вопрос — как получить основное состояние $|\Omega\rangle$? Для этого есть два основных трюка, которые мы обсудим ниже — адиабатическое включение взаимодействия, и мнимое время. Оба трюка, в действительности, практически эквивалентны.

Мнимое время Способ первый заключается в следующем. Давайте рассмотрим эволюцию волновой функции из состояния $|0\rangle$ за большое время, которое при этом имеет маленькую мнимую часть $T(1 - i\epsilon)$. В таком случае, используя разложения по полному набору собственных состояний гамильтониана, мы получим:

$$e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)} |0\rangle = \sum_n e^{-iE_n T} e^{-\epsilon E_n T} |n\rangle \langle 0|n\rangle \approx e^{-iE_\Omega T} e^{-\epsilon E_\Omega T} |\Omega\rangle \langle 0|\Omega\rangle \quad (4.19)$$

Таким образом, такая эволюция действует за счёт малой мнимой части эффективно как проектор на основное состояние — состояние с наименьшей энергией E_Ω . Конечно, тут сразу имеется несколько важных допущений:

- Во-первых, основное состояние должно быть невырождено⁶.
- Во-вторых, оно должно перекрываться с вакуумом⁷ $\langle 0|\Omega\rangle$.
- В-третьих — в идеале, оно должно быть отделено от возбуждённых состояний энергетической щелью⁸.
- Ну и наконец, важен порядок взятия пределов — сперва $T \rightarrow +\infty$, а затем $\epsilon \rightarrow +0$.

Получаем два тождества (обратите внимание: второе тождество НЕ было получено как эрмитово сопряжение первого, поскольку знак в экспоненте остался тем же; оно получено независимо, действуя таким же оператором эволюции на бра-вектор $\langle 0|$):

$$|\Omega\rangle = \frac{e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)}|0\rangle}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)}\langle 0|\Omega\rangle}, \quad \langle \Omega| = \frac{\langle 0|e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)}}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)}\langle \Omega|0\rangle} \quad (4.20)$$

И для произвольной корреляционной функции имеем (мы запомним, что у T есть маленькая мнимая часть, и дальше будем её опускать, ровно как и взятие пределов)

$$\langle \Omega|\hat{O}_1(t_1)\hat{O}_2(t_2)\dots\hat{O}_N(t_N)|\Omega\rangle = \frac{\langle 0|e^{-i\hat{H}T}\hat{O}_1(t_1)\dots\hat{O}_N(t_N)e^{-i\hat{H}T}|0\rangle}{e^{-2iE_\Omega T}|\langle \Omega|0\rangle|^2} \quad (4.21)$$

Наконец, знаменатель можно переписать из тривиального условия $\langle \Omega|1|\Omega\rangle = 1$:

$$e^{-2iE_\Omega T}|\langle \Omega|0\rangle|^2 = \langle 0|e^{-2i\hat{H}T}|0\rangle \quad (4.22)$$

Расписывая явно Шрёдингеровскую зависимость операторов от времён, мы получаем следующую формулу:

$$\langle \Omega|\hat{O}_1(t_1)\hat{O}_2(t_2)\dots\hat{O}_N(t_N)|\Omega\rangle = \frac{\langle 0|\hat{U}(T, t_1)\hat{O}_1\hat{U}(t_1, t_2)\dots\hat{U}(t_{N-1}, t_N)\hat{O}_N\hat{U}(t_N, -T)|0\rangle}{\langle 0|\hat{U}(T, -T)|0\rangle} \quad (4.23)$$

Она хороша тем, что *вакуумные* средние мы уже умеем считать — для них работает теорема Вика, и основываясь на этом выражении мы можем построить теорию возмущений.

Адиабатическое включение взаимодействия Теперь рассмотрим альтернативный трюк, который также позволяет получать основное состояние гамильтониана. Заключается он в следующем: давайте в момент времени $-T$ стартуем с невзаимодействующей системы, описываемой гамильтонианом \hat{H}_0 , а затем «включим» взаимодействие *адиабатически* — условно, введём руками зависимость в гамильтониан от времени вида $\hat{V}(t < 0) = e^{\gamma t}\hat{V}$, с достаточно малой γ . В результате адиабатической теоремы система будет следовать мгновенным состояниям гамильтониана и в результате она окажется в основном состоянии взаимодействующей теории. Заметим также, что этот метод страдает от тех же недугов, а именно — основное состояние должно быть невырождено, и было бы хорошо, чтобы в спектре была щель (в таком случае адиабатичность означает что γ должна быть меньше щели в спектре). В таком случае мы получим попросту следующее:

$$|\Omega\rangle = \hat{U}(0, -T)|0\rangle \quad (4.24)$$

Это приводит нас к следующей формуле:

$$\langle \Omega|\hat{O}_1(t_1)\hat{O}_2(t_2)\dots\hat{O}_N(t_N)|\Omega\rangle = \langle 0|\hat{U}(-T, t_1)\hat{O}_1(t_1)\hat{O}_2(t_2)\dots\hat{O}_N(t_N)\hat{U}(0, -T)|0\rangle \quad (4.25)$$

(эволюция тем самым тут происходит по замкнутому временному контуру — читая справа налево, мы получаем $-T \rightarrow t_N \rightarrow \dots \rightarrow t_1 \rightarrow -T$)⁹. Для того, чтобы продвинуться далее, мы перепишем первый оператор эволюции в виде $\hat{U}(-T, t_1) = \hat{U}(-T, T)\hat{U}(T, t_1)$. Если в момент времени $T \rightarrow +\infty$ взаимодействие также адиабатически выключить, то полная эволюция

⁶Обычно это так, но это может нарушаться в системах со *спонтанно нарушенной симметрией*, где основное состояние имеет значительное вырождение

⁷Это условие может нарушаться в задачах, к которым и невозможно подступиться с позиции теории возмущений — задачам, в которых основное состояние значительно перестраивается. В качестве примера можно привести электроны в металле со слабым притяжением — как известно, это приводит к сверхпроводимости.

⁸В теории Клейна-Гордона это так — поскольку элементарные возбуждения массивны, и имеется щель $\Delta = m$; но это нарушается в квантовой электродинамике, где имеются фотоны со сколь угодно низкой энергией. Это требование не является строгим, и для КЭД теория возмущений работает, но порой она страдает от наличия инфракрасных расходимостей, связанных равно с существованием таких фотонов.

⁹Это выражение обладает большей универсальностью, чем описанное в предыдущем параграфе. В частности, оно не использует независимость гамильтониана от времени — более того, такая временная зависимость важна для вывода этого выражения — и позволяет изучать неравновесные ситуации. На основе этого выражения строится диаграммная техника Келдыша.

$\hat{U}(T, -T)|0\rangle$ приведёт нас обратно в вакуум, с точностью до какой-то фазы (которая, как мы помним из адиабатики, состоит из *динамического вклада* $-\int E(t)dt \approx E_\Omega \cdot 2T$ — и фазы Берри):

$$\hat{U}(T, -T)|0\rangle \simeq e^{i\Phi}|0\rangle \quad (4.26)$$

Это позволяет нам записать цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) | \Omega \rangle &= \langle 0 | \hat{U}(-T, T) \hat{U}(T, t_1) \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) \hat{U}(0, -T) | 0 \rangle = \\ &= e^{-i\Phi} \langle 0 | \hat{U}(T, t_1) \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) \hat{U}(0, -T) | 0 \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{U}(T, t_1) \hat{O} \hat{U}(t_1, t_2) \dots \hat{U}(t_{N-1}, t_N) \hat{O} \hat{U}(t_N, -T) | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{U}(T, -T) | 0 \rangle} \end{aligned} \quad (4.27)$$

что в конечном итоге снова приводит нас к тому же выражению, что и предыдущий трюк.

Представление взаимодействия

Собственно, дальнейшее построение прямолинейно. От представления Шрёдингера мы перейдём к представлению взаимодействия, где эволюция операторов происходит с помощью оператора $\hat{U}_0(t_2, t_1) = e^{-i\hat{H}_0(t_2-t_1)}$ (с невозмущённым гамильтонианом \hat{H}_0), а эволюция волновых функций — с оператором эволюции в представлении взаимодействия $\hat{S}(t_2, t_1) = \hat{U}_0(t_1, t_2) \hat{U}(t_2, t_1)$. Что важно, что при этом эволюция всех операторов будет точно такой же, как мы считали ранее — в этом смысле ничего не изменилось; для оператора эволюции в представлении взаимодействия работает следующая формула:

$$\hat{S}(t_2, t_1) = \hat{T} \left\{ \exp \left(-i \int_{t_1}^{t_2} \hat{V}(\tau) d\tau \right) \right\} \quad (4.28)$$

(и при этом оператор возмущения сам берётся в представлении взаимодействия, так что даже если он исходно от времени не зависел — то теперь будет). Наконец, для произвольной корреляционной функции мы тоже можем перейти к представлению взаимодействия и записать:

$$\langle \Omega | \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) | \Omega \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{S}(T, t_1) \hat{O}_1(t_1) \hat{S}(t_1, t_2) \dots \hat{S}(t_{N-1}, t_N) \hat{O}_N(t_N) \hat{S}(t_N, -T) | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{S}(T, -T) | 0 \rangle} \quad (4.29)$$

Если же операторы при этом сами \mathcal{T} -упорядочены, так что $t_1 > t_2 > \dots > t_N$, то мы можем вставить общий знак \mathcal{T} -упорядочения в правой части; поскольку под \mathcal{T} -упорядочением операторы можно переставлять, то для таких корреляторов мы приходим к следующей формуле:

$$\langle \Omega | \hat{T} \left\{ \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) \right\} | \Omega \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{T} \left\{ \hat{O}_1(t_1) \dots \hat{O}_N(t_N) \hat{S} \right\} | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle}, \quad \hat{S} \equiv \hat{S}(T, -T) \quad (4.30)$$

Раскладывая выражение для оператора эволюции в представлении взаимодействия \hat{S} в ряд, мы будем строить теорию возмущений.

4.2.2 Фейнмановские диаграммы для пропагатора теории ϕ^4

Диаграммная техника естественным образом возникает при разложении \hat{S} -матрицы в ряд по степеням возмущения и дальнейшем применении теоремы Вика. Здесь и далее символ \mathcal{T} -упорядочения будет подразумеваться, но опускаться. Подробное обсуждения вывода правил Фейнмана для теории ϕ^4 можно найти в книжке Пёскина, Шрёдера, глава 4.4 (диаграммы Фейнмана), и переизлагать содержимое этой главы тут бессмысленно. Изложим лишь главные основные результаты для Фейнмановской функции Грина (впрочем, они тривиально обобщаются и на старшие корреляторы).

Правила Фейнмана в координатном представлении

Каждая диаграмма ставится в соответствие некоторому набору Виковских свёрток, и диаграмме ставится в соответствие некоторое аналитическое выражение, представляющее собой вклад в ряд теории возмущений, скажем, для пропагатора:

1. В n -том порядке теории возмущений картинка должна содержать ровно n *вершин взаимодействия* — точек пространства z_1, \dots, z_N , из которых торчит по 4 «хвоста» (они берутся из вида оператора взаимодействия $\hat{V} = \frac{\lambda}{4!} \int \phi^4(x) d^3x$. Каждой такой вершине нужно поставить в соответствие интеграл $(-i\lambda) \cdot \int d^4z_i$.
2. Помимо этого, имеются две дополнительные точки — *внешние концы* x и y . По ним интегрирование не производится.

3. На картинке необходимо провести *спаривание* каким-то способом — соединить свободные концы. По всем возможным *топологически неэквивалентным спариваниям* нужно просуммировать.
4. Соединению точек z_i и z_j (включая внешние концы) ставится в соответствие Фейнмановский пропагатор $-D_F^{(0)}(z_i - z_j)$.
5. Полученное выражение необходимо поделить на *симметричный фактор диаграммы*.

Сокращение вакуумных пузырей

Оказывается, что учитывать нужно только *связные* диаграммы — диаграммы, все вершины которых связаны (возможно, посредством нескольких связей) с одним из внешних концов. Имеет место следующее тождество, которое носит название *экспоненцированием вакуумных пузырей*:

$$\langle 0 | \phi(x) \phi(y) \hat{S} | 0 \rangle = \sum (\text{все диаграммы}) = \sum (\text{все связные диаграммы}) \times \exp \left(\sum (\text{вакуумные пузыри}) \right) \quad (4.31)$$

При этом знаменатель устроен так же, но нет вклада в связные диаграммы, то для знаменателя имеем:

$$\langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle = \exp \left(\sum (\text{вакуумные пузыри}) \right) \quad (4.32)$$

В частности, поскольку, как мы выяснили ранее, $\langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle = |\langle 0 | \Omega \rangle|^2 \exp(-iE_\Omega 2T)$, то сумма вакуумных пузырей (а каждый вакуумный пузырь пропорционален четырёхмерному объёму системы $V_4 = V \cdot 2T!$) даёт попросту энергию основного состояния (отсчитанную от энергии невозмущённой системы, поскольку мы работаем в представлении взаимодействия):

$$\epsilon_\Omega = \frac{E_\Omega}{V_3} = -\frac{1}{V_4} \text{Im} \sum (\text{вакуумные пузыри}) \quad (4.33)$$

Так или иначе, вакуумные пузыри сокращаются, и для пропагатора необходимо учитывать только связные диаграммы:

$$D_F(x - y) = \langle \Omega | \phi(x) \phi(y) | \Omega \rangle = \sum (\text{все связные диаграммы}) \quad (4.34)$$

Уравнение Дайсона

На диаграммном языке можно продвинуться ещё чуть дальше, добавив дополнительную классификацию диаграмм. Назовём диаграмму *одночастично неприводимой*, если она не распадается при разрезании какой-либо одной линии на несвязные куски. Назовём *собственной энергетической частью* $\Sigma(x - y)$ следующий ряд (включим « $-i$ » в определение, смысл которой будет ясен ниже):

$$-i\Sigma(x - y) = \sum (\text{одночастично неприводимые диаграммы с ампутированными концами}) \quad (4.35)$$

(под «ампутированными концами» имеется в виду, что к ним нужно дорисовать какие-то функции Грина, которые исключаются из самого выражения для Σ). В таком случае, диаграммный ряд для пропагатора представляется в следующем операторном виде (то есть везде подразумеваются свёртки):

$$\hat{D}_F = \hat{D}_F^{(0)} + \hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F^{(0)} + \hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F^{(0)} + \dots \equiv \hat{D}_F^{(0)} + \hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F \quad (4.36)$$

или, в координатной форме:

$$D_F(x - y) = D_F^{(0)}(x - y) + \int d^4 z_1 d^4 z_2 D_F^{(0)}(x - z_1) (-i\Sigma(z_1 - z_2)) D_F(z_2 - y) \quad (4.37)$$

Это интегральное уравнение, из которого определяется $D_F(x - y)$, носит название *уравнения Дайсона*. В действительности необходимо строить теорию возмущений именно для собственной энергетической части Σ .

Преобразование Фурье и правила Фейнмана в импульсном представлении

Правила Фейнмана прекрасно переписываются, используя преобразование Фурье — вместо пропагаторов необходимо подставить их преобразования Фурье, и провести некоторые вычисления. Сводится всё к следующему набору правил:

1. На диаграмме Фейнмана каждой линии нужно поставить в соответствие четыре-импульс p_i (и направление, вдоль которого этот импульс «бежит»). В вершинах необходимо учесть закон сохранения четыре-импульса (сумма импульсов с учётом направлений равна нулю) — из-за чего не все импульсы оказываются *независимы*. Помимо этого, имеются внешние концы, через которые в диаграмму «входит» и «выходит» внешний импульс p .
2. Каждой вершине нужно поставить в соответствие $-i\lambda$.
3. Каждому пропагатору, по которому «бежит» импульс p_i ставится в соответствие $D_F^{(0)}(p_i) = \frac{i}{p_i^2 - m^2 + i0}$.
4. По всем незакреплённым законами сохранения импульсам происходит интегрирование $\int \frac{d^4 p_i}{(2\pi)^4}$.
5. И опять диаграмму необходимо разделить на её симметричный фактор.

Используя преобразование Фурье, уравнение Дайсона тривиально решается:

$$D_F(p) = D_F^{(0)}(p) + D_F^{(0)}(p)(-i\Sigma(p))D_F(p) \Rightarrow D_F(p) = \frac{i}{i(D_F^{(0)}(p))^{-1} - \Sigma(p)} = \frac{i}{p^2 - m^2 - \Sigma(p)} \quad (4.38)$$

Из такого представления видно, что собственная энергетическая часть отвечает за различные перенормировки спектра одночастичных возбуждений — например, $\Sigma(p=0)$ представляет собой перенормировку массы.

Заключение

В заключение хочется отметить, что большинство сделанных тут утверждений носит совершенно общий характер. В частности, экспоненцирование и сокращение вакуумных пузырей носит такой же вид в произвольной теории поля; ровно как и сами правила Фейнмана, классификация диаграмм по одночастичной приводимости и уравнение Дайсона. Единственное, что меняется от одной теории поля к другой — это вид *вершин взаимодействия* и *пропагаторов*. В частности, для электрон-фононного взаимодействия необходимо было бы вводить линии двух типов — электронные линии (у которых, к слову, концы неэквивалентны, поскольку пропагатор имеет вид $G(x-y) = \langle \hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(y) \rangle$ — из-за чего на них необходимо рисовать стрелки¹⁰) и фононные линии, а вершины взаимодействия содержат два «электронных» хвоста (соответствующих $\psi^\dagger(x)\psi(x)$) и один фононный (соответствующий $\text{div}\mathbf{u}(\mathbf{r})$).

¹⁰Разные авторы рисуют стрелки по-разному. Например, в книге Абрикосова, Горькова и Дзялошинского, а также у Левитова и Шитова, стрелка в пропагаторе $\langle \hat{\psi}(x)\hat{\psi}^\dagger(y) \rangle$ направлена от точки x (где стоит оператор уничтожения) к точке y (где стоит оператор рождения). У Ландау и Лифшица в «физической кинетике» — наоборот, стрелки рисуют от точки y к точке x — что, возможно, идеологически более правильно, поскольку частица рождается в точке y , оттуда «летит» к точке x и там уничтожается.

Глава 5

Интеграл по траекториям

5.1 ... для квантовой теории поля

5.1.1 Вычисление средних по основному состоянию

Для простоты мы рассмотрим сейчас гамильтониан общего вида для одной частицы, движущейся в каком-то потенциале (например, описываемую гамильтонианом $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})$). В квантовой теории поля ключевым объектом является \mathcal{T} -упорядоченные корреляционные функции, вычисленные по основному состоянию теории — величина осмысленная и для рассматриваемой нами частицы. С другой стороны, в квантовой механике мы выводили представление через функциональный интеграл для немного другой величины — запаздывающего пропагатора, или амплитуды перехода:

$$G_R(x_1, x_2, t_1, t_2) \equiv \langle x_1 | \hat{U}(t_1, t_2) | x_2 \rangle \equiv \int_{x(t_2)=x_2}^{x(t_1)=x_1} \mathcal{D}[x(t)] \exp(iS[x(t)]), \quad t_1 > t_2 \quad (5.1)$$

На этом семинаре мы свяжем одно с другим и научимся считать корреляционные функции в квантовой теории поля с помощью функционального интеграла.

Построение

Итак, мы хотим научиться считать \mathcal{T} -упорядоченные корреляционные функции следующего вида:

$$G(t_1 > \dots > t_N) = \langle \Omega | \hat{x}(t_1) \dots \hat{x}(t_N) | \Omega \rangle \quad (5.2)$$

В качестве отправной точки для построения основного состояния воспользуемся ровно тем-же трюком, которым мы пользовались на прошлом семинаре при выводе диаграммной техники Фейнмана — но с небольшим изменением. Мы стартем не с вакуума (да и что такое вакуум для квантомеханической частицы?), а с произвольного состояния в координатном представлении $|x\rangle$, и подействуем на него эволюцией за большое время с малой мнимой добавкой $T(1 - i\epsilon)$:

$$|\Omega\rangle = \frac{e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)} |x_b\rangle}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)} \langle x_b | \Omega \rangle}, \quad \langle \Omega | = \frac{\langle x_a | e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)}}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)} \langle \Omega | x_a \rangle} \quad (5.3)$$

Кроме этого, опять-таки распишем явно операторы в представлении взаимодействия, а также перепишем знаменатель из условия $\langle \Omega | 1 | \Omega \rangle = 1$. Мы получим представление, которое минимально отличается от использованного на предыдущей лекции:

$$G(t_1, \dots, t_N) = \frac{\langle x_a | \hat{U}(T, t_1) \hat{x} \hat{U}(t_1, t_2) \dots \hat{U}(t_{N-1}, t_N) \hat{x} \hat{U}(t_N, -T) | x_b \rangle}{\langle x_a | \hat{U}(T, -T) | x_b \rangle} \quad (5.4)$$

Знаменатель уже представляет собой амплитуду перехода. В числителе же давайте вставим рядом с каждым оператором координаты разложение единицы по координатному базису: $\mathbb{1} = \int dx_i |x_i\rangle \langle x_i|$. Наконец, для каждой амплитуды перехода воспользуемся представлением через функциональный интеграл:

$$\langle x_a | \hat{U}(T, t_1) \hat{x} \hat{U}(t_1, t_2) \dots \hat{U}(t_{N-1}, t_N) \hat{x} \hat{U}(t_N, -T) | x_b \rangle = \int \prod_{n=1}^N dx_n \cdot x_1 \dots x_n \cdot \prod_{n=0}^N \int_{x_n(t_{n+1})=x_{n+1}}^{x_n(t_n)=x_n} \mathcal{D}[x_n(t)] e^{iS_n[x_n(t)]} \quad (5.5)$$

(с дополнительными условиями $t_0 = T, x_0 = x_a, t_{N+1} = -T, x_{N+1} = x_b$). Мы получаем интегрирование по промежуточным функциям $x_n(t_n > t > t_{n+1})$ с закреплёнными концами, вдобавок к интегрированию по этим самым закреплённым

концам. Вполне естественно объединить все эти промежуточные функции в одну функцию, определённую на всём отрезке $T > t > -T$:

$$x(t) = \begin{cases} x_0(t), & T > t > t_1 \\ \vdots \\ x_n(t), & t_N > t > -T \end{cases} \quad (5.6)$$

Во-первых, в таком случае интегрирование по промежуточным точкам и интегрирование по всем промежуточным функциям очевидным образом соберётся в простое интегрирование по всем функциям вообще (с закреплёнными концами, разумеется). Во-вторых, сумма действий на каждом отрезке времени превратится в полное действие на всей траектории $x(t)$. Наконец, величины x_k в точности равны значению траектории в момент времени $x(t_k)$. С учётом всего вышесказанного, мы получаем следующее выражение через функциональный интеграл для Фейнмановского пропагатора (а мы существенно использовали то, что времена упорядочены!):

$$\langle \Omega | \hat{\mathcal{T}} \{ \hat{x}(t_1) \dots \hat{x}(t_N) \} | \Omega \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] \cdot x(t_1) \dots x(t_N) \cdot \exp(iS[x(t)])}{\int \mathcal{D}[x(t)] \cdot \exp(iS[x(t)])} \quad (5.7)$$

Это — ключевое выражение в нашем выводе. Тут важно сделать несколько замечаний.

- Во-первых, в левой части равенства стоят квантомеханические операторы, а в правой — *обычные числа*. Для них не нужно беспокоиться о коммутативности, и прочих тонкостях. Мелочь, а приятно! Всё оказывается самосогласованным, в том смысле что операторы под знаком \mathcal{T} -упорядочения тоже можно менять местами как угодно.
- Во-вторых, изначально имели место закреплённые граничные условия $x(-T) = x_b$ и $x(T) = x_a$. С другой стороны, мы получили, что ответ от их выбора, в действительности, не зависит — их можно выбирать совершенно произвольными. Более того, чаще всего гораздо удобнее оказываются любые другие граничные условия — например, периодические $x(-T) = x(T)$. Важно то, что в пределе $T \rightarrow \infty$ выбор граничных условий, как правило, на ответ не влияет никак.
- В-третьих, как обычно когда мы имеем дело с функциональными интегралами, в букву $\mathcal{D}[x(t)]$ включён некий бесконечный нормировочный множитель, зависящий от используемой нами дискретизации и регуляризации функционального интеграла. Однако, будучи записанном в таком виде — а именно, в виде отношения двух функциональных интегралов — выбор этих констант может быть абсолютно произвольным, лишь бы они были одинаковы для числителя и знаменателя — они всё равно сократятся. Об этих нормировках мы можем спокойно забыть (чего нельзя было делать, скажем, в исходном выражении для запаздывающего пропагатора — в этом смысле оно плохо определено).
- Наконец, у этого выражения имеется наглядный физический смысл. Он очень уж похож на обыкновенное (правда, функциональное, но это немного меняет) статистическое усреднение по ансамблю, вероятность какой-то реализации этого ансамбля даётся формулой $P[x(t)] = e^{iS[x(t)]}$, а знаменатель — это просто статсумма (нормировочный множитель) этого распределения. Конечно, в теории вероятностей очень важно, что сама вероятность является положительно определённой вещественной величиной — чего не скажешь про нашу «вероятность» — в этом смысле мы имеем дело скорее с амплитудами, чем с вероятностями.

Последнюю аналогию можно развить — по аналогии с статистическими флуктуациями, можно говорить о *квантовых флуктуациях*. Частица движется по всем возможным траекториям, на которые траектории нет никаких ограничений — они не обязательно удовлетворяют уравнениям движения; допустимы траектории, на которых не сохраняется энергия; более того, в принципе допустимы и “подбарьерные” траектории, в которой частица залетает в классически запрещённую область.

Однако стоит заметить, что все “странные” траектории, как правило, малы. Действительно, на подбарьерных траекториях действие оказывается мнимым $S = i|S|$ — что соответствует экспоненциальной подавленности таких траекторий $P \propto e^{-|S|}$.

5.1.2 Функциональный интеграл для квантовой теории поля

Абсолютно всё вышесказанное непосредственно обобщается и на квантовую теорию поля — для этого нужно лишь вспомнить, что квантовая теория поля эквивалентна квантовой механике из большого (в пределе — континуума) числа частиц — и именно из этих соображений мы строили квантовую теорию поля на самой первой лекции. Для построения такой аналогии, помимо дискретизации времени (от построения функционального интеграла) введём также и дискретизацию пространства, разбив его на ячейки размера $a^{d/2}$. Величину поля в дискретных узлах можно обозначать $\phi_{\mathbf{x},t} \equiv \phi(\mathbf{x},t) \cdot a^{d/2}$, и импульсы $\pi_{\mathbf{x},t} \equiv \pi(\mathbf{x},t) \cdot a^{d/2}$. Такое обозначение, в частности, даст коммутационные соотношения $[\hat{\phi}_{\mathbf{x}}, \hat{\pi}_{\mathbf{y}}] = [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\pi}(\mathbf{y})] \cdot a^d = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot a^d \equiv i\delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}$ — канонические соотношения для координат и импульсов. Поэтому заменяя

действие на его дискретный аналог $S[\{\phi_{\mathbf{x}}\}] = \frac{1}{2}L_{ij}\phi_i\phi_j$ ($i = (\mathbf{x}, t)$), и квантуя изложенным выше способом полученную систему, мы приходим ровно к тому же результату, а именно:

$$\langle \Omega | \hat{T} \{ \hat{\phi}(x_1) \dots \hat{\phi}(x_N) \} | \Omega \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\phi(x)] \cdot \phi(x_1) \dots \phi(x_N) \cdot \exp(iS[\phi(x)])}{\int \mathcal{D}[\phi(x)] \cdot \exp(iS[\phi(x)])} \quad (5.8)$$

Функциональный интеграл теперь нужно понимать в смысле дискретизации как пространственно, так и временной, и интегрированию по $\prod_{\mathbf{x},t} d\phi_{\mathbf{x},t}$.

5.1.3 О дискретных Гауссовых интегралах

Поскольку так или иначе мы вынуждены иметь дело с Гауссовыми интегралами, поэтому давайте сразу обсудим общие свойства Гауссовых интегралов.

Вещественные гауссовы интегралы

В вещественном случае, гауссов вес определяется согласно $P(\{\phi\}) = \exp(-\frac{1}{2}\phi_i L_{ij} \phi_j)$ с некоторой симметричной матрицей L_{ij} . Симметричную матрицу можно диагонализировать ортогональным преобразованием \hat{O} , так что $\hat{L} = \hat{O}\hat{\Lambda}\hat{O}^T$ где $\Lambda = \text{diag}(\Lambda_1, \dots, \Lambda_N)$; и совершим ортогональное преобразование (с единичным якобианом) к переменным $\phi = \hat{O}\psi$, и получить следующий интеграл:

$$Z = \int d\phi \exp\left(-\frac{1}{2}\phi_i L_{ij} \phi_j\right) = \int d\psi \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_i \Lambda_i \psi_i^2\right) = \prod_i \sqrt{\frac{2\pi}{\Lambda_i}} = \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\det \hat{L}}} \quad (5.9)$$

Для вычисления средних значений ϕ удобно ввести так называемый производящий функционал:

$$Z[J] = \int d\phi \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\phi_i L_{ij} \phi_j + J_i \phi_i\right) = Z[0] \cdot \langle e^{iJ_i \phi_i} \rangle \quad (5.10)$$

и тогда, например, двойной коррелятор имеет вид:

$$\langle \phi_i \phi_j \rangle = \frac{1}{Z} \cdot \left. \frac{\partial^2 Z[J]}{\partial J_i \partial J_j} \right|_{J=0} \quad (5.11)$$

Для вычисления производящего функционала мы тоже диагонализуем матрица, а затем произведём сдвигку при взятии уже расцепленных интегралов:

$$Z[J] = \int d\psi \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_i \Lambda_i \psi_i^2 + J_j O_{ji} \psi_j\right) = \int d\psi \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_i \Lambda_i (\psi_i + J_j O_{ji} \Lambda_i^{-1})^2 + \frac{1}{2} J_j O_{ji} \Lambda_i^{-1} O_{ik}^T J_k\right) \quad (5.12)$$

Беря интеграл по ψ , мы получаем $Z[0]$ для квадратичной части, а также остаточный член, который выражается попросту через обратную матрицу $\hat{L}^{-1} \equiv \hat{O}\hat{\Lambda}^{-1}\hat{O}^T$. Получаем важный результат:

$$Z[J] = Z[0] \cdot \exp\left(\frac{1}{2} J_i L_{ij}^{-1} J_j\right) \quad (5.13)$$

Дифференцируя, мы получаем важный результат — корреляционную функцию $\langle \phi_i \phi_j \rangle = L_{ij}^{-1}$.

Комплексные гауссовы интегралы

Иногда также приходится сталкиваться с комплексными теориями поля (мы обсуждали комплексную теорию Клейна-Гордона). Для них гауссов интеграл устроен немного иначе: вес определяется согласно $P(\{\phi, \bar{\phi}\}) = \exp(-\bar{\phi}_i L_{ij} \phi_j)$ (без $1/2$). Интегрирование производится по вещественным и мнимым частям ϕ_i , что мы условно обозначим как $d\phi_i d\bar{\phi}_i \equiv d(\text{Re}\phi_i) d(\text{Im}\phi_i)$. Матрицу \hat{A} можно в таком случае диагонализировать унитарным преобразованием \hat{U} , так что $\hat{L} = \hat{U}\hat{\Lambda}\hat{U}^\dagger$, и $\phi = \hat{U}\psi$. Гауссов интеграл запишется в таком случае следующим образом:

$$Z = \int d\phi d\bar{\phi} \exp(-\bar{\phi}_i L_{ij} \phi_j) = \int d\bar{\psi} d\psi \exp\left(-\sum_i \Lambda_i |\psi_i|^2\right) = \prod_i \frac{\pi}{\Lambda_i} = \frac{\pi^N}{\det \hat{L}} \quad (5.14)$$

Производящий функционал определяется чуть иначе:

$$Z[J, \bar{J}] = \int d\phi \exp(-\bar{\phi}_i L_{ij} \phi_j + \bar{J}_i \phi_i + J_i \bar{\phi}_i) = Z[0] \cdot \langle e^{\bar{J}_i \phi_i + J_i \bar{\phi}_i} \rangle \quad (5.15)$$

из которого корреляторы извлекаются аналогичным образом:

$$\langle \phi_i \bar{\phi}_j \rangle = \frac{1}{Z} \cdot \left. \frac{\partial^2 Z[J, \bar{J}]}{\partial \bar{J}_i \partial J_j} \right|_{J=0} \quad (5.16)$$

Интеграл, тем не менее, вычисляется абсолютно аналогично — диагонализацией и сдвижкой:

$$\int d\psi \exp\left(-\sum_i \Lambda_i |\psi_i|^2 + \bar{J}_j U_{ji} \psi_i + \bar{\psi}_i U_{ij}^\dagger J_j\right) = \int \int d\psi \exp\left(-\sum_i \Lambda_i (\bar{\psi}_i - \Lambda_i^{-1} \bar{J}_j U_{ji}) (\psi_i - \Lambda_i^{-1} U_{ij}^\dagger J_j) + \bar{J}_j U_{ji} \Lambda_i^{-1} U_{ik}^\dagger J_k\right) \quad (5.17)$$

И опять собирается обратная матрица $\hat{L}^{-1} = \hat{U} \hat{\Lambda}^{-1} \hat{U}^\dagger$, а результат получается следующим:

$$\boxed{Z[J, \bar{J}] = Z[0] \cdot \exp(\bar{J}_i L_{ij}^{-1} J_j)} \quad (5.18)$$

В частности, из этого выражения следуют следующие корреляционные функции: $\langle \phi_i \bar{\phi}_j \rangle = L_{ij}^{-1}$, $\langle \phi_i \phi_j \rangle = \langle \bar{\phi}_i \bar{\phi}_j \rangle = 0$.

Теорема Вика

Если бы мы хотели посчитать коррелятор, скажем, четвёртого порядка (давайте пока сфокусируемся на вещественном случае, как на более простом), нам требовалось бы взять коррелятор четвёртого порядка:

$$\langle \phi_i \phi_j \phi_k \phi_l \rangle = \frac{1}{Z} \cdot \left. \frac{\partial^4 Z[J]}{\partial J_i \partial J_j \partial J_k \partial J_l} \right|_{J=0} \quad (5.19)$$

Для того, чтобы получить не ноль — нам нужно два раза продифференцировать экспоненту (что «выдаст» член в предэкспоненту) и два раза — возникающие при этом предэкспоненциальные множители. Перебор всех возможных случаев сведётся к тому, что необходимо рассматривать *спаривания* различных членов. И «спаривание», скажем, ϕ_i и ϕ_j означает, что производная $\frac{\partial}{\partial J_i}$ действует на экспоненту, а $\frac{\partial}{\partial J_j}$ — на возникающий при этом преэкспоненциальный множитель, и наоборот. Несложно убедиться, что процедура «выдаст» попросту $L_{ij}^{-1} = \langle \phi_i \phi_j \rangle$. Это приводит нас к теореме Вика:

$$\langle \phi_i \phi_j \phi_k \phi_l \rangle = \langle \phi_i \phi_j \rangle \langle \phi_k \phi_l \rangle + \langle \phi_i \phi_k \rangle \langle \phi_j \phi_l \rangle + \langle \phi_i \phi_l \rangle \langle \phi_j \phi_k \rangle, \quad (5.20)$$

которая известным образом обобщается и на произвольный старший коррелятор. Этим и доказывается теорема Вика для Гауссовых случайных распределений.

5.1.4 Функция Грина свободного поля

Вернёмся теперь к свободной квантовой теории поля, которая даётся квадратичным действием — например, теорию Клейна-Гордона $S = \frac{1}{2} \int d^4x ((\partial_\mu \phi)^2 - m^2 \phi^2)$. Естественно, мы введём дискретизацию и будем пользоваться результатами предыдущих пунктов. Есть несколько отличий, которые, впрочем, практически не влияют на результат. Первое отличие заключается в том, что вес комплексный и имеет вид e^{iS} , поэтому производящий функционал определяется тоже немного иным образом — с дополнительной мнимой единицей:

$$Z[J(x)] = \int \mathcal{D}[\phi(x)] \exp\left(iS[\phi(x)] + i \int J(x) \phi(x) dx\right) \equiv Z[0] \cdot \left\langle \exp\left(i \int J(x) \phi(x) dx\right) \right\rangle_0 \quad (5.21)$$

и корреляторы считаются следующим образом:

$$\langle \phi(x) \phi(y) \rangle = \frac{1}{Z} \left(-i \frac{\delta}{\delta J(x)}\right) \left(-i \frac{\delta}{\delta J(y)}\right) Z[J(x)] \Big|_{J=0} \quad (5.22)$$

Для квадратичного действия вида $S[\phi(x)] = \frac{1}{2} \int dx \phi(x) \hat{L} \phi(x)$, всё вышесказанное тоже работает (учётom замены $L_{ij} \mapsto -i\hat{L}$ и $J_i \mapsto iJ(x)$, а значит $L_{ij}^{-1} \mapsto i\hat{L}^{-1} \equiv i\hat{G}$ — функция Грина соответствующего оператора!), для производящего функционала ответ оказывается следующим:

$$\boxed{Z[J(x)] = Z[0] \cdot \exp\left(-\frac{i}{2} \int dx dy J(x) G(x-y) J(y)\right)} \quad (5.23)$$

и тем самым мы доказываем следующее утверждение, которое мы получали ранее: коррелятор связан с функцией Грина классических уравнений движения — $\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = iG(x-y)!$

Тут есть проблема — в теории Клейна-Гордона оператор $\hat{L} = -\partial^2 - m^2$ имеет нулевые моды — плоские волны e^{ipx} с соотношением $p^2 = m^2$, и поэтому оператор, вообще говоря необратим. При попытке же решить задачу через преобразование Фурье это «выскакивает» как наличие полюсов по энергии $\omega = \pm\sqrt{p^2 + m^2}$, которые лежат чисто на вещественной оси; различные способы обхода этих полюсов приводят к различным способам обращения оператора и, соответственно, к различным функциям Грина. Для того, чтобы увидеть, что мы имеем дело именно с Фейнмановской функцией Грина и соответствующий ему способ обхода полюсов — необходимо вспомнить про маленькую мнимую часть у времени $T(1-i\epsilon)$ — что соответствует маленькому повороту в комплексной плоскости времени, или, что эквивалентно, повороту в плоскости частот в обратном направлении $\omega \mapsto \omega(1+i\epsilon)$ (поворот контура на малый угол против часовой стрелки). Такой поворот как раз определяет нам правило обхода полюсов — полюс $\omega = -\sqrt{p^2 + m^2}$ необходимо обходить снизу, в $\omega = +\sqrt{p^2 + m^2}$ — сверху.

Таким образом, тот факт что Фейнмановский пропагатор соответствовал функции Грина классических уравнений движения — оказывается вовсе не совпадением, но утверждением самого общего характера.

5.1.5 Теория возмущений

Наконец, представление функционального интеграла также позволяет тривиально строить теорию возмущений, которая в точности воспроизводит теорию возмущений, которую мы обсуждали на прошлом семинаре. В частности, пусть действие имеет вид $S = S_0 + S_{int}$; тогда для корреляторов можно записать:

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(y) e^{iS_0 + iS_{int}} / \int \mathcal{D}\phi \cdot e^{iS_0}}{\int \mathcal{D}\phi e^{iS_0 + iS_{int}} / \int \mathcal{D}\phi e^{iS_0}} = \frac{\langle \phi(x)\phi(y) e^{iS_{int}} \rangle_0}{\langle e^{iS_{int}} \rangle_0} \quad (5.24)$$

Раскладывая экспоненту в ряд и применяя теорему Вика, мы получим диаграммный ряд Фейнмана, который в точности воспроизводит полученный ранее (в частности, $S_{int} = -\int dt V_{int}$).

5.2 ... для многочастичной квантовой механики

5.2.1 Когерентные состояния

В многочастичной квантовой механике, в отличие от, например, рассматриваемой ранее теории Клейна-Гордона, отправной точкой является не Лагранжев формализм и функционал действия, а представление вторичного квантования и операторы рождения и уничтожения частиц. Для неё, тем не менее, тоже можно построить представление функционального интеграла, слегка модифицировав обсуждаемую ранее схему. Как и ранее, мы будем дискретизовать время, представляя оператор эволюции $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t)$ в виде произведения N операторов $\hat{U}(\epsilon = \frac{t}{N})$, между которыми мы будем вставлять единичные операторы в виде разложения по некоторому набору. В отличие от координатного и импульсного базиса, для многочастичной квантовой механики оказываются удобными «когерентные состояния» — собственные состояния оператора уничтожения \hat{a} (через которые записывается гамильтониан). Давайте напомним, что они из себя представляют.

Бозонные когерентные состояния

Пусть есть собственная функция оператора уничтожения \hat{a} с собственным числом $\phi \in \mathbb{C}$:

$$\hat{a}|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle, \quad \langle\phi|\hat{a}^\dagger = \langle\phi|\bar{\phi} \quad (5.25)$$

Состояние $|\phi\rangle$ в таком случае может быть построено явно:

$$|\phi\rangle = e^{\phi\hat{a}^\dagger} |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (5.26)$$

Когерентные состояния не образуют ортонормированную систему; можно вычислить перекрытие двух когерентных состояний:

$$\langle\theta|\phi\rangle = \exp(\bar{\theta}\phi) \quad (5.27)$$

Кроме того, они образуют переполненный набор; это означает, что разложение единицы имеет следующий вид:

$$\hat{\mathbb{1}} = \int \underbrace{\frac{d(\text{Re}\phi)d(\text{Im}\phi)}{\pi}}_{\equiv d\phi d\bar{\phi}} e^{-|\phi|^2} |\phi\rangle \langle\phi| \quad (5.28)$$

Все полученные свойства тривиально обобщаются и на произвольное количество бозонных состояний (как, собственно, и бывает в многочастичной квантовой механике), описываемых каким-то набором операторов \hat{a}_n с коммутационными соотношениями $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$.

Фермионные когерентные состояния

Фермионы устроены чуть сложнее — ведь если $|\eta\rangle$ является собственным для оператора уничтожения $\hat{a}|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle$, то в силу принципа Паули $\hat{a}^2 = 0$, что неизбежно влечёт $\eta^2 = 0$. Кроме того, фермиевские операторы антикоммутируют. Всё это приводит нас к мысли о том, что для построения фермионных когерентных состояний нужна специальная алгебра — алгебра *грассмановых чисел*.

Лирическое отступление. Грассмановы числа

Грассманову алгебру мы введём формальным образом как алгебру антикоммутирующих чисел. Пусть имеется набор грассмановых чисел $\{\eta_i\}_{i=1}^N$.

1. Основным свойством их мы положим антикоммутативность по отношению к произведению:

$$\eta_i \eta_j = -\eta_j \eta_i \quad (5.29)$$

Ассоциативность $\eta_1(\eta_2\eta_3) = (\eta_1\eta_2)\eta_3$ и дистрибутивность $\eta_1(\eta_2 + \eta_3) = \eta_1\eta_2 + \eta_1\eta_3$ по-прежнему выполняются.

2. Непосредственно из определения следует то, что квадрат произвольного грассманового числа равен нулю $\eta^2 = 0$. Кроме того, *пары* грассмановых чисел (или любое их чётное количество) ведут себя как обычные числа — коммутируют со всеми; например, $\eta_1(\eta_2\eta_3) \equiv (\eta_2\eta_3)\eta_1$.
3. Помимо перемножения, их числа можно складывать и домножать на обычные \mathbb{C} -числа. Число самого общего вида тем самым можно представить как произвольную линейную комбинацию следующих 2^N объектов (то есть мы имеем дело с линейным пространством со следующими «базисными векторами»):

$$\{1, \eta_1, \dots, \eta_N, \eta_1\eta_2, \eta_1\eta_3, \dots, \eta_{N-1}\eta_N, \dots, \eta_1 \dots \eta_N\} \quad (5.30)$$

4. Мы можем определить действие произвольной аналитической функции на грассманово число η через разложение в ряд Тейлора:

$$\forall c \in \mathbb{C} \mapsto f(c + \eta) = f(c) + f'(c) \cdot \eta \quad (5.31)$$

(все следующие члены зануляются).

5. Исходя из предыдущего свойства, мы можем формально ввести операцию *дифференцирования* по грассмановому числу через определение:

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j = \delta_{ij} \quad (5.32)$$

Кроме дифференцирования, по грассмановым числам можно также и *интегрировать*, причём эти две операции тождественно совпадают:

$$\int d\eta_i \eta_j = \delta_{ij} \quad (5.33)$$

(стоит обратить внимание, что в таком случае для кратных интегралов «дифференциалы» $d\eta$ тоже антикоммутируют: $\int d\eta_1 d\eta_2 \eta_1 \eta_2 = -\int d\eta_1 \int d\eta_2 \eta_2 \eta_1 = -\int d\eta_1 \eta_1 = -1$, что эквивалентно $\int d\eta_1 d\eta_2 \eta_1 \eta_2 = -\int d\eta_2 \underbrace{d\eta_1 \eta_1}_{=0} \eta_2 = -\int d\eta_2 \eta_2 = -1$). В частности, $\frac{\partial}{\partial \eta_i} 1 = \int d\eta_i \cdot 1 = 0$.

6. Можно ввести операцию *комплексного сопряжения* для грассмановых чисел $\bar{\eta}_i$ — её мы просто определим как дающую независимое грассманово число, так что $\bar{\bar{\eta}}_i = \eta_i$. В таком смысле, грассмановых чисел попросту удваивается $\{\eta_1, \dots, \eta_N, \bar{\eta}_1, \dots, \bar{\eta}_N\}$.

7. Наконец, можно вычислить гауссов грассманов интеграл:

$$\int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) e^{-\sum_{ij} \bar{\eta}_i L_{ij} \eta_j} = \det L \quad (5.34)$$

Можно просто это проверить для диагональной матрицы:

$$\int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) \exp(-\sum_i \lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i) = \int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) \prod_i \exp(-\lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i) = \int \prod_i (d\eta_i d\bar{\eta}_i \cdot (1 - \lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i)) = \prod_i \lambda_i \quad (5.35)$$

Тут мы в первом равенстве воспользовались тем, что пары грассмановых чисел ведут себя как обычные числа, а во втором — взятием экспоненты от грассманового числа¹.

Продолжение

Итак, продолжим наше построение когерентных состояний, вооружившись грассмановой алгеброй. Мы выяснили, что собственное число фермионного оператора уничтожения обязано быть грассмановым; с учётом нашего определения для комплексного сопряжения, имеем:

$$\hat{a} |\eta\rangle = \eta |\eta\rangle, \quad \langle \eta | \hat{a}^\dagger = \langle \eta | \bar{\eta}$$

Для такого состояния тоже работает выражение через экспоненту:

$$|\eta\rangle = e^{\eta \hat{a}^\dagger} |0\rangle = (1 + \eta \hat{a}^\dagger) |0\rangle = |0\rangle + \eta |1\rangle \quad (5.36)$$

С учётом нашего определения комплексного сопряжения, мы также имеем $\langle \eta | = \langle 0 | + \langle 1 | \bar{\eta}$ и $\langle \eta | \hat{a}^\dagger = \langle \eta | \bar{\eta}$. Перекрытие когерентных состояний равно:

$$\langle \eta_i | \eta_j \rangle = (\langle 0 | + \langle 1 | \bar{\eta}_i) (|0\rangle + \eta_j |1\rangle) = 1 + \bar{\eta}_i \eta_j = \exp(\bar{\eta}_i \eta_j) \quad (5.37)$$

Кроме того, также работает и разложение единицы:

$$\hat{\mathbb{I}} = \int d\bar{\eta} d\eta e^{-\bar{\eta} \eta} |\eta\rangle \langle \eta| = \int d\bar{\eta} d\eta (1 - \bar{\eta} \eta) (|0\rangle + \eta |1\rangle) (\langle 0 | + \bar{\eta} \langle 1 |) = |0\rangle \langle 0 | + |1\rangle \langle 1 | \quad (5.38)$$

Таким образом, фермионные когерентные состояния устроены абсолютно точно так же, как и бозонные — за исключением того, что они даются грассмановыми числами (различие имеется разве что в множителе π в определении $d\bar{\phi}d\phi$).

5.2.2 Интеграл по траекториям

С учётом всего вышесказанного, давайте вернёмся к многочастичной квантовой механике. Рассмотрим для простоты гамильтониан квантового осциллятора $\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}$ (рассмотрение мы будем вести для бозонов и фермионов одновременно — ведь когерентные состояния устроены одинаково!), а затем проведём тривиальное обобщение на произвольный многочастичный гамильтониан. Как обычно, мы стартуем с пропагатора, который определим как амплитуду перехода между двумя когерентными состояниями:

$$G_R(\phi, \phi', T > 0) = \langle \phi | e^{-i\hat{H}T} | \phi' \rangle \quad (5.39)$$

Будем действовать стандартным образом, вставляя разложение единиц по когерентным состояниям:

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int \prod_{k=1}^{N-1} (d\bar{\phi}_k d\phi_k \exp(-\bar{\phi}_k \phi_k)) \langle \phi_N \equiv \phi | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_{N-1} \rangle \dots \langle \phi_2 | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_0 \equiv \phi' \rangle \quad (5.40)$$

Если гамильтониан $\hat{H} = H(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ нормально упорядочен (и только тогда!), матричные элементы считаются прямолинейно:

$$\langle \phi_{k+1} | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_k \rangle \approx \langle \phi_{k+1} | (1 - iH(\hat{a}^\dagger, \hat{a})\epsilon) | \phi_k \rangle = \langle \phi_{k+1} | \phi_k \rangle \cdot (1 - iH(\bar{\phi}_{k+1}, \phi_k)\epsilon) \approx \exp(\bar{\phi}_{k+1} \phi_k - iH(\bar{\phi}_{k+1}, \phi_k)\epsilon) \quad (5.41)$$

И, наконец, для пропагатора мы получаем следующее выражение:

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int \prod_{k=1}^{N-1} d\bar{\phi}_k d\phi_k \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \bar{\phi}_k \phi_k + \sum_{k=1}^N \bar{\phi}_k \phi_{k-1} - i\epsilon \sum_{k=1}^N H(\bar{\phi}_k, \phi_{k-1}) \epsilon \right) \quad (5.42)$$

Для данного выражение непосредственно строится и непрерывный предел. Интегрирование происходит по всем комплексным (для бозонов) или грассмановым (для фермионов)² функциям $\phi(t)$ с закреплёнными концами $\phi(t=0) = \phi'$ и $\phi(t=T) = \phi$; а действие имеет следующий вид:

¹Сравните с обычными числами, для которых гауссов интеграл имеет вид $\int \prod_i (d\bar{z}_i dz_i) \exp(-\sum_{ij} \bar{z}_i L_{ij} z_j) = (\det L)^{-1}$ (если мы определили $d\bar{z}_i dz_i \equiv \frac{1}{\pi} d(\text{Re} z_i) d(\text{Im} z_i)$). На этом основана идея суперсимметрии — если взять одинаковое число грассмановых и обычных чисел, то, скажем, гауссов интеграл будет вообще равен единице.

²Конечно, грассманова алгебра хорошо определена для счётного количества грассмановых переменных, и такой объект как грассманова функция порой может смущать (например, $\phi^2(t) = 0$, но $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi(t + \epsilon) \phi(t) = ?$). Чтобы понять, какой смысл вкладывается в то или иное выражение, стоит возвращаться к дискретному представлению, где всё хорошо определено.

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int_{\phi(0)=\phi'}^{\phi(T)=\phi} \mathcal{D}[\bar{\phi}(t), \phi(t)] \cdot e^{iS[\bar{\phi}(t), \phi(t)]}, \quad S = \int dt (i\bar{\phi}\partial_t\phi - H(\bar{\phi}(t), \phi(t))) \quad (5.43)$$

Наконец, используя рассуждения предыдущей лекции, мы можем от пропагатора перейти сразу к многочастичной квантовой механике (вместо одного состояния) и квантовой теории поля, а также к вычислению средних по основному состоянию. Скажем, для частиц с парным взаимодействием с потенциалом $U(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ многочастичный гамильтониан имел вид:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{x} \frac{1}{2m} \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad (5.44)$$

и, скажем, Фейнмановский пропагатор запишется следующим образом:

$$\langle \Omega | \mathcal{T} \{ \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t') \} | \Omega \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \cdot \psi(\mathbf{x}, t) \bar{\psi}(\mathbf{y}, t') \exp(i \int dt \cdot L[\bar{\psi}, \psi])}{\int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp(i \int dt \cdot L[\bar{\psi}, \psi])} \quad (5.45)$$

$$L = \int d\mathbf{x} \left(i\bar{\psi}\partial_t\psi - \frac{|\nabla\psi|^2}{2m} \right) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 |\psi(\mathbf{y}, t)|^2 U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (5.46)$$

Прелесть в том, что в правой части поля $\psi(\mathbf{x}, t)$ — это уже обычные (для фермионов — грассмановы) числа, которые устроены куда проще операторов. Из этого представления также тривиально показывается, что Фейнмановский пропагатор является функцией Грина оператора $i\partial_t - \hat{H}$ — то, что мы получали ранее непосредственным вычислением. Кроме того, тот факт, что поля ψ для фермионов грассмановы полностью согласуется с возникновением знака «минус» в определении \mathcal{T} -упорядочения фермионных операторов.

5.2.3 Большой канонический ансамбль

Будучи построенным так, функциональный интеграл даёт среднее по состоянию с минимальной энергией полного гамильтониана \hat{H} . Даже для взаимодействующих частиц, скажем, с отталкиванием, это основное состояние устроено тривиально как $|\Omega\rangle = |0\rangle$ (и $\hat{H}|0\rangle = 0$) — но это совершенно не то, что нам интересно! Как правило, мы интересуемся *условным минимумом* — а именно, нас интересует основное состояние с фиксированным числом частиц — с дополнительным условием $\langle \Omega | \hat{N} | \Omega \rangle = N$. К счастью, полученная схема достаточно просто модифицируется и для этой задачи — с использованием множителей Лагранжа:

$$\min_{\forall \psi: \langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = N} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \Leftrightarrow \min_{\forall \psi} \langle \psi | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi \rangle \text{ and } \langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = N \quad (5.47)$$

Задача на условный минимум $E(\psi) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ при дополнительном условии $N(\psi) = \langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = N$ тем самым эквивалентна нахождению *безусловного* минимума модифицированного функционала $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$, где множитель Лагранжа μ должен быть найден из условия $\langle \psi | \hat{N} | \psi \rangle = N$. Последний же уже можно найти с помощью аппарата функционального интегрирования.

В статистической физике величина μ носит название *химического потенциала*, а ансамбль систем с фиксированным химическим потенциалом носит название *большого канонического ансамбля*. Он противопоставляется *каноническому ансамблю* — ансамблю систем с фиксированным числом частиц; и в термодинамическом пределе они эквивалентны. Поэтому сухой остаток такой: если число частиц сохраняется, то для использования аппарата функционального интегрирования необходимо гамильтониан заменить на «большой канонический гамильтониан» $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$.

5.3 Слабонеидеальный Бозе-газ

5.3.1 Постановка задачи

В качестве демонстрации методов функционального интегрирования, мы рассмотрим Бозе-газ с фиксированным числом частиц и точечным взаимодействием $U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ между частицами, описываемый следующим гамильтонианом:

$$\hat{H}' = \int d\mathbf{x} \left(\frac{\nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla \hat{\Psi}}{2m} - \mu \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \right) \quad (5.48)$$

«Статсумма» функционального интеграла имеет следующий вид:

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi] \exp \left(i \int dt d\mathbf{x} \left[i\bar{\Psi}\partial_t\Psi - \frac{|\nabla\Psi|^2}{2m} + \mu|\Psi|^2 - \frac{g}{2}|\Psi|^4 \right] \right) \quad (5.49)$$

5.3.2 Коденсат

Рассмотрение системы мы проведём с помощью метода перевала. Обычно, когда мы имели дело с «хорошими» теориями поля типа «фи-в-четвёртой», седловое решение было тривиально — $\phi = 0$. В данном же случае, варьируя действие по Ψ , мы получаем, что седловая конфигурация удовлетворяет так называемому уравнению Гросса-Питаевского (нелинейному уравнению Шрёдингера с отталкиванием):

$$i\partial_t\psi + \frac{\Delta\psi}{2m} + \mu\psi - g|\psi|^2\psi = 0 \quad (5.50)$$

Седловое решение мы будем называть «конденсатной волновой функцией»; пусть вас это не смущает, к обычным бозонным волновым функциям это не имеет отношения. В однородном (без внешнего потенциала) и стационарном (без возмущающих сил) случае ψ само не зависит ни от пространственных координат, ни от временных, и нам достаточно минимизировать лишь «потенциал» $U(|\psi|^2) = -\mu|\psi|^2 + \frac{g}{2}|\psi|^4$. При $\mu, g > 0$ такой потенциал носит название «мексиканской шляпы», и он имеет целый вырожденный континуум минимумов, параметризуемых $U(1)$ -фазой ϕ :

$$|\psi_0|^2 = \frac{\mu}{g} \Rightarrow \psi_0 = \sqrt{\frac{\mu}{g}} e^{i\phi}, \quad U_0 = -\frac{\mu^2}{2g} \quad (5.51)$$

Наличие такого макроскопического вырождения — прямое следствие наличия $U(1)$ симметрии исходного действия — симметрии по отношению к фазовым вращениям $\psi \mapsto \psi e^{i\phi}$. Последняя, в свою очередь, по теореме Нётер связано с сохранением числа частиц $|\psi|^2$. Можно было бы предположить, что система «растечётся» по минимуму неким симметричным образом, и будет даваться линейной комбинацией минимумов с различными фазами; *истинное* основное состояние устроено именно так. Однако в действительности же оказывается, что такое «растекание» происходит за экспоненциально большое (по размеру системы) время, то есть в термодинамическом пределе — никогда; и в результате, опять же в термодинамическом пределе мы имеем дело с континуумом основных состояний, среди которых система выбирает какое-то одно конкретное. В таких случаях говорят о *спонтанном нарушении симметрии* (в данном случае речь идёт об $U(1)$ -симметрии), что практически всегда связано с фазовыми переходами второго рода³.

5.3.3 Основное состояние

Мы приходим к выводу, что в рамках седлового приближения, в системе образуется *Бозе-конденсат* $\psi_0(\mathbf{x}, t)$, удовлетворяющий уравнению Гросса-Питаевского. Это значит, что в рамках всё того же седлового приближения имеется ненулевое *аномальное среднее* $\langle \Omega | \hat{\Psi}(\mathbf{x}, t) | \Omega \rangle = \psi_0(\mathbf{x}, t)$ — объект, который в «нормальных» теориях попросту не может существовать в силу закона сохранения числа частиц, но который возникает в рамках такого седлового рассмотрения. Появление аномального среднего является одним из признаков Бозе-конденсации⁴; последняя происходит тогда, когда *макроскопически большое* (пропорциональное объёму системы) число частиц скапливается в одном квантомеханическом состоянии⁵. При конечных температурах она происходит тогда, когда химический потенциал μ (зависящий, вообще говоря, от температуры) оказывается положительным $\mu \geq 0$.

В рамках того же седлового приближения, полное число частиц в системе равно $N = \langle \Omega | \hat{N} | \Omega \rangle \simeq \int d\mathbf{x} |\psi_0(\mathbf{x})|^2 = \frac{\mu}{g} V$ — откуда можно найти связь химического потенциала и числа частиц при нуле температур, $\mu = gn$. Хорошим анзацем для основного состояния, обладающим необходимым свойством наличия аномальных средних, является *когерентное состояние* — состояние, собственное для оператора уничтожения⁶:

$$|\Omega\rangle \simeq |\psi_0\rangle = \exp\left(\int d\mathbf{x} \psi_0(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\right) |0\rangle, \quad \hat{\Psi}(\mathbf{x}) |\psi_0\rangle = \psi_0(\mathbf{x}) |\psi_0\rangle \quad (5.52)$$

Поучительным оказывается вычисления перекрытия двух состояний с различными фазами конденсата:

$$\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 \rangle = \exp\left(e^{-i\phi} \int d\mathbf{x} |\psi_0(\mathbf{x})|^2\right) \Rightarrow P = \frac{|\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 \rangle|^2}{\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 e^{i\phi} \rangle \cdot \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \exp(-2N(1 - \cos\phi)) \quad (5.53)$$

Это вычисление и демонстрирует, что такие когерентные состояния в термодинамическом пределе становятся ортогональными друг другу, а время перехода между состояниями с различными фазами для конечных систем экспоненциально велико.

³Другим простым примером спонтанного нарушения симметрии является ферромагнетизм — хотя исходно в обычных ферромагнетиках нет никакой выделенной оси и в этом смысле оно изотропно (обладает $O(3)$ вращательной симметрией), но при низких температурах оно приобретает конечную намагниченность, направленную в каком-то выделенном направлении — симметрия спонтанно нарушается

⁴С точки зрения теории фазовых переходов Ландау, аномальное среднее является *параметром порядка* соответствующего фазового перехода

⁵Даже если число частиц строго фиксировано и никакого аномального среднего нет, наличие или отсутствие конденсата можно выяснить по возникновению *дальнего порядка* — асимптотики корреляционной функции $\langle \Omega | \psi(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{y}) | \Omega \rangle \rightarrow \psi_0(\mathbf{x}) \psi_0^*(\mathbf{y})$ при $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$.

⁶Мы с этими состояниями уже сталкивались выше, когда строили представление функционального интеграла для многочастичной квантовой механики. Именно в контексте конденсации Бозе-Эйнштейна становится понятно, о какой именно когерентности речь — оно так называется как раз потому, что представляет собой хороший анзац для основного состояния конденсата.

Глава 6

Элементы флуктуационной теории фазовых переходов II рода

6.1 Вступление. Фазовые переходы II рода

Фазовые переходы второго рода, как правило, связаны с появлением (или исчезновением) нового элемента симметрии в системе. Классическим примером фазового перехода второго рода может служить переход «парамагнетик-ферромагнетик». Высокотемпературная парамагнитная фаза обладает полной вращательной симметрией, в ней «стрелочки» локальной намагниченности направлены произвольным образом, так что макроскопически образец не обладает намагниченностью. Однако при прохождении некоторой температуры фазового перехода T_c (для ферромагнетиков это точка Кюри) системе оказывается выгодно приобрести спонтанную намагниченность. Последняя направлена в каком-то конкретном направлении, в связи с чем симметрия системы понижается (от полных вращений остаётся только вращение в плоскости перпендикулярной намагниченности) — такое явление носит название спонтанного нарушения симметрии. Как правило, высокотемпературная фаза имеет большую симметрию (она менее упорядочена), в то время как низкотемпературной фазе соответствует упорядочение понижение симметрии.

Ключевым объектом в теории фазовых переходов является так называемый *параметр порядка* — некоторая численная характеристика, описывающая возникновение порядка. Проще всего понять, что из себя представляет параметр порядка можно на конкретных примерах. В ферромагнетиках параметром порядка является намагниченность \mathbf{m} (в этом смысле параметр порядка — трёхкомпонентный вектор); в Бозе-конденсации или сверхпроводимости параметром порядка являются аномальные средние $\langle \Omega | \hat{\psi} | \Omega \rangle$ и $\langle \Omega | \hat{\psi}_\uparrow \hat{\psi}_\downarrow | \Omega \rangle$ соответственно (для них параметр порядка — это комплексное число). Параметр порядка в низкотемпературной фазе отличен от нуля, но при критической температуре T_c он зануляется — происходит переход в неупорядоченную фазу.

Большое количество величин в окрестности фазовых переходов испытывают степенные сингулярности, показатели которых называются *критическими индексами*. Среди фазовых переходов второго рода имеется *универсальность* — критические индексы оказываются одинаковыми или почти одинаковыми для целых классов фазовых переходов (классификация происходит более или менее по симметрии параметра порядка). Обычно вводят следующие критические индексы:

1. Критический индекс теплоёмкости α , показывающий характер сингулярности теплоёмкости $C \propto |T - T_c|^{-\alpha}$.
2. Критический индекс параметра порядка β , показывающий по какому закону он обращается в ноль: $\phi \propto (T_c - T)^\beta$.
3. Критический индекс восприимчивости γ , показывающий по какому закону восприимчивость параметра порядка по отношению к внешнему полю обращается в бесконечность (с обеих сторон фазового перехода!): $\chi = \frac{\partial \phi}{\partial h} \propto |T - T_c|^{-\gamma}$.
4. Критический индекс корреляционной длины ν : $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$. Корреляционная длина — важный пространственный масштаб, демонстрирующий характерные длины, на которых параметр порядка изменяется и флуктуирует.
5. Критический индекс δ , показывающий, как зависит параметр порядка от внешнего поля при строгой критической температуре (где восприимчивость обращается в бесконечность): $\phi \propto |h|^{1/\delta}$.
6. Критический индекс η , характеризующий корреляции параметра порядка на масштабах $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll \xi$: $\langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle \propto |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-d+2-\eta}$. На масштабах больших ξ корреляции, как правило, экспоненциально затухают.

6.2 Модель Изинга

Рассмотрим простейшую модель, на примере которой можно продемонстрировать особенности фазовых переходов второго рода — модель Изинга. Она формулируется в терминах дискретных спиновых переменных $\sigma_{\mathbf{r}} = \pm 1$, которые расположены

в узлах решётки. Энергия системы имеет следующий вид:

$$H[\{\sigma_{\mathbf{r}}\}] = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} \quad (6.1)$$

Для простоты мы будем предполагать ферромагнитный характер взаимодействия, $J_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} > 0$, а также трансляционную инвариантность: $J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \equiv J_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}$.

Система помещена в термостат с температурой T и описывается распределением Гиббса:

$$P[\{\sigma_{\mathbf{r}}\}] = \frac{1}{Z} e^{-\beta H[\{\sigma_{\mathbf{r}}\}]}, \quad Z = \sum_{\{\sigma_{\mathbf{r}}\}=\pm 1} e^{-\beta H[\{\sigma_{\mathbf{r}}\}]} \quad (6.2)$$

Мы будем интересоваться вычислением различных корреляционных функций. Для этого можно ввести производящий функционал:

$$Z[\{h_{\mathbf{r}}\}] = \sum_{\{\sigma_{\mathbf{r}}\}=\pm 1} \exp \left(-\beta \left(H[\{\sigma_{\mathbf{r}}\}] - \sum_{\mathbf{r}} h_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right) \right) \quad (6.3)$$

и тогда корреляционные функции (причём как приводимые, так и неприводимые) можно вычислять дифференцированием по «источникам»:

$$\langle \sigma_{\mathbf{r}_1} \dots \sigma_{\mathbf{r}_n} \rangle = \frac{1}{Z[0]} \frac{\partial}{\partial h_{\mathbf{r}_1}} \dots \frac{\partial}{\partial h_{\mathbf{r}_n}} Z[\{h_{\mathbf{r}}\}], \quad \langle \langle \sigma_{\mathbf{r}_1} \dots \sigma_{\mathbf{r}_n} \rangle \rangle = \frac{\partial}{\partial h_{\mathbf{r}_1}} \dots \frac{\partial}{\partial h_{\mathbf{r}_n}} \ln \frac{Z[\{h_{\mathbf{r}}\}]}{Z[0]} \quad (6.4)$$

6.2.1 Теоретико-полевое описание

Работать с дискретными переменными неприятно, поэтому для вычисления $Z[\{h_{\mathbf{r}}\}]$ мы воспользуемся стандартным трюком — преобразованием Хаббарда-Стратановича, которое основано на следующем Гауссовом интеграле¹:

$$\int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} (\beta J)_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1} \phi_{\mathbf{r}'} \right) = 1, \quad \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \equiv \frac{\prod_{\mathbf{r}} d\phi_{\mathbf{r}}}{\sqrt{\det(2\pi\beta\hat{J})}} \quad (6.5)$$

(этот Гауссов интеграл описывает теорию поля с пропагатором $\langle \phi_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{r}'} \rangle = \beta J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}$). Величину $\phi(\mathbf{r})$ мы будем называть *параметром порядка* в этой задаче. Сделаем в нём сдвигку $\phi_{\mathbf{r}} \mapsto \phi_{\mathbf{r}} - \sum_{\mathbf{r}_1} \beta J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_1} \sigma_{\mathbf{r}_1}$ и получим:

$$\int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} (\beta J)_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1} \phi_{\mathbf{r}'} + \sum_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}} \right) = \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} \right) \quad (6.6)$$

Главная ценность такого преобразования — оно превратило слагаемое, которое исходно было квадратичным по спиновым переменным, в линейное. После него мы можем взять след по спиновым переменным и получить:

$$\begin{aligned} Z[\{h_{\mathbf{r}}\}] &= \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} (\beta J)_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1} \phi_{\mathbf{r}'} \right) \sum_{\{\sigma_{\mathbf{r}}\}=\pm 1} \exp \left(\sum_{\mathbf{r}} (\beta h_{\mathbf{r}} + \phi_{\mathbf{r}}) \sigma_{\mathbf{r}} \right) \\ &= \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} (\beta J)_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1} \phi_{\mathbf{r}'} + \sum_{\mathbf{r}} \ln(2 \cosh(\phi_{\mathbf{r}} + \beta h_{\mathbf{r}})) \right) \end{aligned} \quad (6.7)$$

Наконец, в качестве последнего штриха мы можем сделать сдвигку $\phi_{\mathbf{r}} \mapsto \phi_{\mathbf{r}} - \beta h_{\mathbf{r}}$ и получить теорию поля со следующим производящим функционалом:

$$Z[\{h_{\mathbf{r}}\}] = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \beta h_{\mathbf{r}} (\beta J)_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1} \beta h_{\mathbf{r}'} \right) \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left(-\beta F[\phi_{\mathbf{r}}] + \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \phi_{\mathbf{r}} (\beta J)_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{-1} \beta h_{\mathbf{r}'} \right) \quad (6.8)$$

¹У преобразования Хаббарда-Стратановича довольно большая свобода выбора параметров. Выбор матрицы $(\beta\hat{J})^{-1}$ физически будет соответствовать тому, что $\phi_{\mathbf{r}}$ будет играть роль эффективного поля, действующего на спин $\sigma_{\mathbf{r}}$.

Альтернативно можно было бы рассмотреть преобразование ХС с матрицей $(\beta\hat{J})$; в таком случае $\phi_{\mathbf{r}}$ играло бы роль буквально локальных намагниченностей.

где «действие» для полей ϕ_r (в контексте термодинамики его имеет смысл называть свободной энергией) имеет вид:

$$\beta F[\{\phi_r\}] = \frac{1}{2} \sum_{r,r'} \phi_r (\beta J)_{r,r'}^{-1} \phi_{r'} - \sum_r \ln(2 \cosh \phi_r) \quad (6.9)$$

Благодаря источникам мы можем связать корреляционные функции исходных спинов и корреляционные функции полей ϕ . В частности, раскладывая до второго порядка, мы получаем:

$$Z[\{h_r\}] \approx Z[0] \left(1 + \sum_r \beta h_r (\beta J)_{r,r'}^{-1} \langle \phi_r \rangle + \frac{1}{2} \sum_{r,r'} \beta h_r \left[(\beta J)_{r,r_1}^{-1} \langle \phi_{r_1} \phi_{r_2} \rangle (\beta J)_{r_2,r'}^{-1} - (\beta J)_{r,r'}^{-1} \right] \beta h_{r'} \right) \quad (6.10)$$

то есть:

$$\langle \sigma_r \rangle \equiv \sum_{r'} (\beta J)_{r,r'}^{-1} \langle \phi_{r'} \rangle, \quad \langle \sigma_r \sigma_{r'} \rangle = (\beta J)_{r,r_1}^{-1} \langle \phi_{r_1} \phi_{r_2} \rangle (\beta J)_{r_2,r'}^{-1} - (\beta J)_{r,r'}^{-1} \quad (6.11)$$

6.2.2 Функционал Ландау

Положим источники равными нулю, и исследуем полученную теорию поля. Сперва мы идентифицируем наличие в задаче фазового перехода. Для этого предлагается воспользоваться методом перевала; и в силу трансляционной инвариантности, мы будем искать лишь пространственно-однородное седловое решение $\phi_r = \phi = \text{const}$. Тогда:

$$\frac{\partial F[\{\phi_r\}]}{\partial \phi_r} = 0 \Leftrightarrow \sum_{r'} (\beta J)^{-1} \phi_{r'} = \tanh \phi_r \Rightarrow \phi = \beta J_0 \tanh \phi, \quad J_0 \equiv \sum_r J_r \quad (6.12)$$

У этого уравнения всегда имеется тривиальное, парамагнитное решение $\phi = 0$; а при $\beta J_0 > 1$, возникает нетривиальное решение $\phi \neq 0$, соответствующее конечной спонтанной намагниченности системы. Таким образом, мы получили температуру фазового перехода $T_c = J_0$.

Рассмотрим теперь окрестность фазового перехода, обозначив $\tau = \frac{T}{T_c} - 1 \ll 1$. Разложимся вблизи $\phi = 0$, и сделаем преобразование Фурье в следующем виде:

$$\phi_q = \frac{1}{N} \sum_r \phi_r e^{-iqr}, \quad h_q = \frac{1}{N} \sum_r h_r e^{-iqr}, \quad J_q \equiv \sum_r J_r e^{-iqr} \quad (6.13)$$

Тогда действие примет вид:

$$\beta F[\{\phi_r, h_r\}] = N \ln 2 + \frac{N}{2} \sum_q [(\beta J_q)^{-1} - 1] \phi_q \phi_{-q} + N \sum_q (\beta J_q)^{-1} \phi_q h_{-q} + \frac{1}{12} \sum_r \phi_r^4 \quad (6.14)$$

Мы видим, что фазовый переход соответствует тому, что мода при $q = 0$ становится неустойчивой (получает отрицательное собственное число). Исследуем моды в окрестности $q = 0$; для этого мы также разложимся по импульсам:

$$J_q = J_0(1 - q^2 \xi_0^2), \quad \xi_0^2 \equiv \frac{1}{2dJ_0} \sum_r J_r r^2, \quad q \xi_0 \ll 1 \quad (6.15)$$

Величина ξ_0 тут имеет смысл типичной длины взаимодействия; получим:

$$\beta F[\{\phi_r\}] \approx N \ln 2 + \frac{N}{2} \sum_q (\tau + q^2 \xi_0^2) \phi_q \phi_{-q} + N \sum_q \phi_q h_{-q} + \frac{1}{12} \sum_r \phi_r^4 \quad (6.16)$$

Наконец, проведём континуальный предел, который соответствует заменам

$$\sum_r \mapsto \int \frac{d\mathbf{r}}{V_0}, \quad \sum_q \mapsto \int V(d\mathbf{q}) \quad (6.17)$$

где V_0 — объём элементарной ячейки системы. Получаем:

$$\beta F[\phi(\mathbf{r})] \approx N \ln 2 + \int \frac{d\mathbf{r}}{V_0} \left(\frac{1}{2} [\tau \cdot \phi^2(\mathbf{r}) + \xi_0^2 \cdot (\nabla \phi)^2] + \frac{1}{12} \phi^4(\mathbf{r}) + h(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \right) \quad (6.18)$$

В окрестности T_c , связь корреляционных функций исходных спинов и полей ϕ наиболее тривиальна — в действительности, мы можем попросту идентифицировать² $\phi(\mathbf{r})$ и $\sigma_{\mathbf{r}}$:

$$\langle \sigma_{\mathbf{r}} \rangle \approx \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle, \quad \langle \sigma_{\mathbf{r}} \sigma_{\mathbf{r}'} \rangle \approx \langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle \quad (6.19)$$

Это — функционал Ландау для модели Изинга. Проговорим ещё раз предположения, в рамках которых он был выведен:

1. Это — разложение функционала свободной энергии в ряд Тейлора по параметру порядка ϕ ; поэтому флуктуации ϕ предполагаются маленькими. Это верно в окрестности точки фазового перехода, $\tau = \frac{T}{T_c} - 1 \ll 1$.
2. Член типа «массы» (по аналогии с теорией Клейна-Гордона) — коэффициент перед ϕ^2 — зануляется в точке перехода, а в её окрестности ведёт себя линейно. Именно условие неустойчивости — возникновение моды с отрицательным собственным числом — и определяет точку перехода.
3. Градиентное разложение по параметру $q\xi_0 \ll 1$ означает, что эта теория описывает систему на масштабах $r \gg \xi_0$.

Кроме того:

1. Параметр порядка ϕ наследует симметрию исходных (микроскопических) переменных. В частности, поскольку исходная задача была симметрична по отношению к замене $\sigma \mapsto -\sigma$ (дискретная симметрия \mathbb{Z}_2), то и полученная теория симметрична по отношению к замене $\phi \mapsto -\phi$.
2. Более того, несложно видеть, что это — общее свойство; например, если бы мы аналогично рассмотрели более реалистичную модель векторных спинов \mathbf{S} , скажем, с наложенным условием $\mathbf{S}^2 = 1$ (вращательная симметрия $O(d)$), то и параметр порядка был бы векторным, а функционал обладал бы вращательной симметрией.

6.3 Теория Ландау

Выше был приведён *микроскопический* вывод теории Ландау для модели Изинга. Предположения, в рамках которых эта теория была выведена, а также свойства полученной теории носят самый общий характер — всё вышесказанное относится к более или менее любому фазовому переходу II рода.

Ландау была предложена феноменологическая теория, претендующая на их описание. В рамках этой теории вводится параметр порядка, описывающий фазовый переход, а свободная энергия раскладывается в ряд Тейлора по степеням малости параметра порядка, а также по его градиентам:

$$F[\phi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{1}{2}(a\phi^2 + c(\nabla\phi)^2) + \frac{1}{4!}b\phi^4 \right] \quad (6.20)$$

1. Коэффициент перед квадратичной частью раскладывается линейно по температуре вблизи точки фазового перехода $a(T) \approx \alpha \cdot (T - T_c)$. При этом $\alpha > 0$ (что соответствует тому, что фаза с нарушенной симметрией — это низкотемпературная фаза); $c > 0$ (что соответствует тому, что параметр порядка «стремится» быть однородным в пространстве); $b > 0$ (что обеспечивает конечность ϕ в низкотемпературной фазе).
2. Симметрия функционала соответствует симметрии фазового перехода. Например, если мы имеем дело с намагниченностью, то симметрия по отношению к инверсии $\mathbf{m} \rightarrow -\mathbf{m}$ гарантирует, что останутся только чётные степени; а симметрия по отношению к вращениям показывает, что свободная энергия может зависеть только от длины вектора \mathbf{m}^2 . Напротив, в сверхпроводимости, где параметр порядка комплексный, свободная энергия может зависеть только от $|\psi|^2$ в силу калибровочной инвариантности.

Исходя из таких самых общих соображений уже можно достаточно много сказать про свойства системы вблизи перехода.

6.3.1 Однородный случай

Рассмотрим сначала пространственно однородные решения. Минимум свободной энергии достигается при:

$$\phi = \begin{cases} \pm \sqrt{\frac{6\alpha}{b}} \cdot (T_c - T)^{1/2}, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases} \Rightarrow \beta = \frac{1}{2} \quad (6.21)$$

²Точные (затравочные) корреляционные функции имеют вид

$$G_{\mathbf{q}}^{(\phi)} = \frac{\beta J_{\mathbf{q}}}{1 - \beta J_{\mathbf{q}}}, \quad G_{\mathbf{q}}^{(\sigma)} = \frac{1}{\beta J_{\mathbf{q}}} \left(\frac{G_{\mathbf{q}}^{(\phi)}}{\beta J_{\mathbf{q}}} - 1 \right) = \frac{1}{1 - \beta J_{\mathbf{q}}}$$

Из этого мы заключаем, что в окрестности T_c в теории Ландау параметр порядка ведёт себя корневым образом (соответствующий критический индекс тем самым $\beta = \frac{1}{2}$):/ Свободная энергия, связанная с параметром порядка, тем самым ведёт себя следующим образом:

$$\mathcal{F}(T) \equiv \frac{F(T)}{V} = \begin{cases} -\frac{3a^2}{2b} \simeq -\frac{3\alpha^2}{2b}(T - T_c)^2, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases} \quad (6.22)$$

В соответствии общей классификацией фазовых переходов второго рода, вторая производная свободной энергии по температуре испытывает скачок. В частности, скачок испытывает удельная теплоёмкость:

$$c = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \Rightarrow \Delta c = -\frac{3\alpha^2}{b} \quad (6.23)$$

Можно также ввести внешнее поле — член $-h\phi$, и рассмотреть восприимчивость $\chi = \frac{\partial \phi}{\partial h}$ по отношению к этому полю; она оказывается равной $\chi = \frac{1}{\alpha(T - T_c)}$ (при $T > T_c$), и тем самым критический индекс $\gamma = 1$. В самой критической точке параметр порядка зависит от поля как $\phi = (6h/b)^{1/3}$, поэтому критический индекс $\delta = 3$.

6.3.2 Флуктуации

Рассмотрим температуру слегка выше критической, $T > T_c$. Тогда, пренебрегая членом φ^4 , мы получаем Гауссов функциональный интеграл — и для вычисления коррелятора достаточно обратить соответствующий дифференциальный оператор. Получаем:

$$G(\mathbf{k}) = \frac{T}{a + ck^2} \Rightarrow G(\mathbf{r}) = \frac{T}{4\pi c} \cdot \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad \xi = \sqrt{\frac{c}{a}} \propto (T - T_c)^{-1/2} \quad (6.24)$$

Корреляции с расстоянием затухают экспоненциально, и в системе имеется характерный масштаб — длина корреляции ξ , на котором типично меняется параметр порядка, и который расходится в точке фазового перехода. Тем самым мы находим ещё два критических индекса: $\eta = 0$ и $\nu = \frac{1}{2}$.

6.3.3 Применимость [TODO]

Теорию Ландау можно вывести из микроскопических соображений для различных «средне-полевых» теорий — теорий, в которых взаимодействие происходит между большим количеством элементов; для них она работает достаточно хорошо. Другим примером, где она выводится является теория сверхпроводимости, для которой полученная теория показала себя прекрасно и объяснила большое количество экспериментальных фактов. С другой стороны, конкретно в модели Изинга она работает хуже. Это связано с тем, что теория возмущений по нелинейному члену φ^4 устроена крайне плохо — этот член сильно меняет поведение системы. Для модели Изинга в системах размерности больше или равных 4 теория Ландау работает прекрасно, с чем связана процедура ϵ -разложения — для вычисления, например, критических индексов рассматривается система в пространстве размерности $4 - \epsilon$ ($\epsilon \ll 1$), а затем полученный асимптотический ряд по ϵ суммируется оптимально, положив $\epsilon = 1$. Такой способ имеет умеренно хорошую точность, которая, к сожалению, ограничена. В целом, применимость теории Ландау сильно зависит от размерности пространства и характера параметра порядка (является ли он вектором, числом, комплексным числом и т.п.)

Список литературы

- Altland, A. и B. Simons (2010). *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press.
- Зи, (2009). *Квантовая теория поля в двух словах*. НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика».
- Пескин, и Шрёдер (2001). *Введение в квантовую теорию поля*. НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика».
- Левитов, и Шитов (2003). *Функции Грина. Задачи и решения*. ФИЗМАТЛИТ.
- Ландау, и Лифшиц (2002). *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. т. 3. ФИЗМАТЛИТ.
- (2003). *Теория упругости*. т. 7. ФИЗМАТЛИТ.