

Семинары по курсу “Введение в квантовую теорию поля”

Общая редакция И.В. Побойко

Планы лекций и наборы задач для самостоятельной работы разработаны группой, в которую входят И. Побойко и Н. Степанов.

## Аннотация

В рамках курса обсуждаются основные вопросы, возникающие при изучении квантовой теории поля. На примере теории свободного бозона в четырёхмерном пространстве-времени демонстрируется подход канонического квантования теорий поля, а на примере возмущения вида «фи-в-четвёртой» выводятся основные правила диаграммной техники Фейнмана в операторном формализме, а также в формализме интеграла по траекториям. В курсе также обсуждается возникновение и элементарные применения аппарата квантовой теории поля в задачах физики твёрдого тела, включая элементы многочастичной квантовой механики и вторичного квантования, а также квантование колебаний одноатомного трёхмерного кристалла.

Курс рассчитан на студентов 3 курса ФОПФ МФТИ и не предполагает никакого предварительного знания помимо базового курса квантовой механики. Для закрепления материала, к каждой лекции прилагается набор из нескольких задач.

## Программа курса

1. Элементы классической теории поля:
  - Лагранжев и гамильтонов формализм классической механики
  - Связь скобок Пуассона в классической механике и коммутаторов в квантовой механике. Теорема Эренфеста
  - Обобщение изложенных методов на классическую теорию поля на примере теории свободного бозона
2. Квантование поля Клейна-Гордона:
  - Разложение полевых операторов по набору решений классических уравнений движения
  - Алгебра бозонных операторов рождения и уничтожения. Поле как совокупность частиц
  - Энергия вакуума, ультрафиолетовые расходимости и эффект Казимира
3. Вторичное квантование и многочастичная квантовая механика:
  - Постановка задачи многочастичной квантовой механики. Бозоны и фермионы, детерминант Слэтера
  - Устройство многочастичного гильбертового пространства, Фоковское пространство. Представление чисел заполнения
  - Алгебра операторов рождения и уничтожения для бозонов и фермионов. Описание задач многочастичной квантовой механики на языке квантовой теории поля
4. Модели сильной связи и графен:
  - Блоховские волновые функции и состояния Ванье для кристаллов
  - Прыжковые (туннельные) гамильтонианы в представлении вторичного квантования
  - Спектр, закон дисперсии и структура низкоэнергетических возбуждений графена в модели сильной связи. Долинное вырождение, «дираковские фермионы» в графене
5. Фононы:
  - Квантование трёхмерной одноатомной решётки, фононы. Продольные и поперечные моды. Описание колебаний в рамках аппарата квантовой теории поля
  - Деформационный потенциал как модель взаимодействия электронов с продольными акустическими фононами
  - Экранировка Кулоновского взаимодействия в рамках приближения Томаса-Ферми
6. Функции Грина:
  - Запаздывающая, опережающая и Фейнмановская функции Грина, вычисления их в рамках теории свободного бозона
  - Теорема Вика для вакуумных средних полевых операторов
7. Фейнмановская диаграммная техника:
  - Возникновение диаграммной техники на примере теории «фи-в-четвёртой»

- Симметричные комбинаторные множители, связанные с Фейнмановскими диаграммами. Экспоненцирование и сокращение вакуумных пузырей
- Связь вакуумных пузырей и энергии основного состояния
- Блочное суммирование. Уравнение Дайсона

8. Функциональный интеграл для квантовой теории поля:

- Гауссов функциональный интеграл и теорема Вика. Функциональный детерминант
- Выражение для Фейнмановского пропагатора квантовой теории поля через функциональный интеграл для теории Клейна-Гордона

9. Функциональный интеграл для многочастичной квантовой механики:

- Когерентные состояния для бозонов
- Грассмановы числа и когерентные состояния для фермионов
- Вывод функционального интеграла для вторично-квантованных гамильтонианов
- Большой канонический ансамбль, химический потенциал
- Слабонеидеальный Бозе-газ
- Бозе-конденсация и спонтанное нарушение симметрии. Аномальные средние.

10. Элементы теории Ландау фазовых переходов:

- Фазовые переходы второго рода, критические индексы
- Разложение свободной энергии вблизи фазового перехода по степеням параметра порядка и градиентам. Выражение свободной энергии через функциональный интеграл
- Разложение вблизи седла с спонтанно нарушенной симметрией на примере комплексного параметра порядка. Теорема Голдстоуна, звук
- Флуктуационный вклад в теплоёмкость

# Содержание

I	Классическая теория поля	4
	Задачи	8
II	«Вторичное квантование» теории Клейна-Гордона	9
	Задачи	12
III	Многочастичная квантовая механика и вторичное квантование	14
	Задачи	19
IV	Модели сильной связи и графен	21
	Задачи	28
V	Фононы	29
	Задачи	35
VI	Функции Грина	36
	Задачи	40
VII	Фейнмановская диаграммная техника	42
	Задачи	47
VIII	Интеграл по траекториям в квантовой теории поля	50
	Задачи	55
IX	Интеграл по траекториям в многочастичной квантовой механике	56
	Задачи	63
X	Элементы теории Ландау фазовых переходов второго рода	64
	Задачи	67
	Список литературы	68

## Лекция I

# Классическая теория 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.

### Классическая механика $N$ степеней свободы

**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  $\{q_i(t)\}_{i=1}^N$  соответствует экстремали функционала  $S[q_i(t)]$ , называемого *действием*. В рамках классической механики, действие представляет собой интеграл от *функции Лагранжа*  $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ , представляющей собой разность кинетической и потенциальной энергий:

$$S[q_i(t)] = \int dt \cdot L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t) \quad (\text{I.1})$$

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

$$\delta S[q_i(t)] = \int dt \cdot (L(q_i + \delta q_i, \dot{q}_i + \delta \dot{q}_i, t) - L(q_i, \dot{q}_i, t)) = \int dt \left( \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) = \int dt \underbrace{\left( \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)}_{\equiv \frac{\delta S}{\delta q_i(t)}} \delta q_i \quad (\text{I.2})$$

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

$$\frac{\delta S}{\delta q_i(t)} = \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad (\text{I.3})$$

**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*  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ , и выразить все скорости  $\dot{q}_i(t)$  через них; а затем произвести преобразование Лежандра функции Лагранжа, перейдя к функции Гамильтона:

$$H(q_i, p_i, t) \equiv \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (\text{I.4})$$

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

$$\begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H(q_i, p_i, t)}{\partial q_i} \end{cases} \quad (\text{I.5})$$

**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:

$$\{A(q_i, p_i, t), B(q_i, p_i, t)\} \equiv \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \quad (\text{I.6})$$

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

$$\{A, B\} + \{B, A\} \equiv 0, \quad \{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} \equiv 0 \quad (\text{I.7})$$

Кроме того, несложно заметить следующие соотношения:

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (\text{I.8})$$

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

$$\frac{dA(q_i(t), p_i(t), t)}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\} \quad (\text{I.9})$$

**Каноническое квантование** Наконец, как осуществляется переход от классической механики к квантовой? Всем наблюдаемым величинам ставятся в соответствие эрмитовы операторы  $A \mapsto \hat{A}$ , действующие в гильбертовом пространстве волновых функций; и один из способов построения квантовой механики заключается в постулировании связи коммутационных соотношений между этими операторами и классической скобки Пуассона:  $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv i\{A, B\}$ <sup>1</sup>

## Классическая теория поля

**Непрерывный предел** 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 осуществления такого непрерывного предела заключаются в следующем:

$$L(q_i) \mapsto L[\phi(\mathbf{x})], \quad \sum_i \mapsto \int d\mathbf{x}, \quad \delta_{ij} \mapsto \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \frac{\partial}{\partial q_i} \mapsto \frac{\delta}{\delta\phi(\mathbf{x})} \quad (\text{I.10})$$

**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)<sup>2</sup>:

$$S[\phi(\mathbf{x}, t)] = \int dt L[\phi(\mathbf{x}, t), \partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t)], \quad L[\phi(\mathbf{x}, t), \partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t)] = \int d\mathbf{x} \mathcal{L}(\phi(\mathbf{x}, t), \partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t)) \quad (\text{I.11})$$

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

$$\frac{\delta S}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} = \frac{\delta L}{\delta\phi(\mathbf{x}, t)} - \partial_\mu \frac{\delta L}{\delta(\partial_\mu \phi(\mathbf{x}, t))} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} = 0 \quad (\text{I.12})$$

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

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

$$\pi(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta(\partial_t \phi(\mathbf{x}))} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \phi)}, \quad (\text{I.13})$$

и после чего произвести преобразование Лежандра, переходя к функционалу Гамильтона<sup>3</sup>:

$$H[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})] = \int d\mathbf{x} \pi(\mathbf{x}) \partial_t \phi(\mathbf{x}) - L[\phi(\mathbf{x}), \partial_\mu \phi(\mathbf{x})] \quad (\text{I.14})$$

<sup>1</sup>Конечно, 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.

<sup>2</sup>Не 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.

<sup>3</sup>Стоит 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

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

$$H[\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}, t)] = \int d\mathbf{x} \mathcal{H}(\phi(\mathbf{x}), \nabla\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})), \quad \mathcal{H} = \pi\partial_t\phi - \mathcal{L} \quad (\text{I.15})$$

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

$$\begin{cases} \frac{d\phi(\mathbf{x}, t)}{dt} = \frac{\delta H}{\delta\pi} = \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\pi} \\ \frac{d\pi(\mathbf{x}, t)}{dt} = -\frac{\delta H}{\delta\phi} = -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\phi} + \nabla\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\nabla\phi)} \end{cases} \quad (\text{I.16})$$

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

$$\{A[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})], B[\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{x})]\} = \int d\mathbf{x} \left[ \frac{\delta A}{\delta\phi(\mathbf{x})} \frac{\delta B}{\delta\pi(\mathbf{x})} - \frac{\delta A}{\delta\pi(\mathbf{x})} \frac{\delta B}{\delta\phi(\mathbf{x})} \right] \quad (\text{I.17})$$

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

$$\{\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y})\} = 0, \quad \{\pi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})\} = 0, \quad \{\phi(\mathbf{x}), \pi(\mathbf{y})\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (\text{I.18})$$

Наконец, уравнения движения и процедура квантования полностью аналогичны.

### 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:

$$S[\phi] = \frac{1}{2} \int d^4x ((\partial_\mu\phi)^2 - m^2\phi^2) = \frac{1}{2} \int d^4x ((\partial_t\phi)^2 - (\nabla\phi)^2 - m^2\phi^2) \quad (\text{I.19})$$

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

$$\frac{\delta S}{\delta\phi} = -(\partial^2 + m^2)\phi = 0, \quad \partial^2 = \partial_t^2 - \nabla^2 \quad (\text{I.20})$$

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

$$H[\phi, \pi] = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} (\pi^2 + (\nabla\phi)^2 + m^2\phi^2) \quad (\text{I.21})$$

и уравнения Гамильтона записываются следующим образом:

$$\begin{cases} \partial_t\phi = \pi \\ \partial_t\pi = -m^2\phi + \nabla^2\phi \end{cases} \quad (\text{I.22})$$

### Пример: «уравнение Шрёдингера»

Давайте теперь рассмотрим комплексное поле  $\psi(\mathbf{x})$  со следующим действием:

$$S[\psi, \bar{\psi}] = \int dt d^d\mathbf{x} \cdot \bar{\psi}(\mathbf{x})(i\partial_t - \hat{H})\psi(\mathbf{x}), \quad (\text{I.23})$$

где  $\hat{H}$  — некий самосопряжённый дифференциальный оператор, действующий на координату (например,  $\hat{H} = -\frac{\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{x})$ ). Комплексность поля  $\psi$  означает, что вообще говоря оно имеет две независимые степени свободы (вещественную и мнимую часть поля). Однако более удобно формально считать  $\psi$  и  $\bar{\psi}$  независимыми динамическими переменными, и варьировать по ним независимо.

Уравнения движения в таком случае записываются в следующем виде:

$$\begin{cases} \frac{\delta S}{\delta \bar{\psi}(\mathbf{x})} = (i\partial_t - \hat{H})\psi = 0 \\ \frac{\delta S}{\delta \psi(\mathbf{x})} = (-i\partial_t - \hat{H}^*)\bar{\psi} = 0 \end{cases} \quad (\text{I.24})$$

(несложно видеть, что эти уравнения комплексно сопряжены, поэтому достаточно иметь дело только с первым). Уравнение движения совпадает с уравнением Шрёдингера, с чем и вызван интерес к этой теории поля<sup>4</sup>.

Если продолжить схему, то мы немедленно столкнёмся с проблемой, которая связана с паталогичностью этой теории — а именно, уравнения по времени всего лишь первого порядка, из-за чего применение гамильтонового формализма к ней, вообще говоря, не очень осмысленно (в частности, нет «скоростей» как отдельных степеней свободы, из-за чего импульс, сопряжённый к первой координате, совпадает со второй). Однако, мы «закроем» на это глаза и продолжим, а проверку проведём в самом конце (проверка будет заключаться в том, что уравнения движения должны получиться правильными). Итак:

$$\pi_\psi = \frac{\delta L}{\delta(\partial_t \psi)} = i\bar{\psi}, \quad \pi_{\bar{\psi}} = \frac{\delta L}{\delta(\partial_t \bar{\psi})} = 0 \quad (\text{I.25})$$

$$H = \int d^d \mathbf{x} \cdot (i\bar{\psi}\partial_t \psi - (i\bar{\psi}\partial_t \psi - \bar{\psi}\hat{H}\psi)) = \int d^d \mathbf{x} \cdot \bar{\psi}(\mathbf{x})\hat{H}\psi(\mathbf{x}) \quad (\text{I.26})$$

Наконец, уравнения движения:

$$\begin{cases} \partial_t \psi = \frac{\delta H}{\delta \pi_\psi} = -i\frac{\delta H}{\delta \bar{\psi}} \\ \partial_t \pi_\psi = -\frac{\delta H}{\delta \psi} \end{cases} \Rightarrow \boxed{\begin{cases} i\partial_t \psi = \frac{\delta H}{\delta \bar{\psi}} = \hat{H}\psi \\ -i\partial_t \bar{\psi} = \frac{\delta H}{\delta \psi} = \hat{H}^*\bar{\psi} \end{cases}} \quad (\text{I.27})$$

Кроме того, полезно вычислить скобку Пуассона:  $\{\psi(\mathbf{x}), \bar{\psi}(\mathbf{y})\} = -i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ .

## Литература

[ПШ, Глава 2.2 «Элементы классической теории поля»]

<sup>4</sup>Вообще говоря, подобная теория поля часто встречается в нелинейной гидродинамике в контексте «нелинейного уравнения Шрёдингера» и т.п.



## Задачи

### Задача 1. Комплексное поле Клейна-Гордона

Рассмотрите теорию, определённую для комплекснозначных полей  $\phi(\mathbf{x}) \in \mathbb{C}$ , задаваемую следующим действием:

$$S[\phi, \bar{\phi}] = \int d^4x \cdot (\partial_\mu \phi \partial_\mu \bar{\phi} - m^2 \phi \bar{\phi}) = \int d^4x (|\partial_\mu \phi|^2 - m^2 |\phi|^2) \quad (1.28)$$

1. Считая поля  $\phi(\mathbf{x})$  и  $\bar{\phi}(\mathbf{x})$  независимыми динамическими переменными, получите уравнения движения такой теории.
  2. Постройте канонически сопряжённые полям  $\phi$  и  $\bar{\phi}$  импульсы  $\pi$  и  $\bar{\pi}$ , и перейдите к гамильтонову описанию этой теории.
- \* В этой задаче имеется непрерывная  $U(1)$  симметрия, соответствующая преобразованию  $\phi \mapsto \phi e^{i\theta}$  и  $\bar{\phi} \mapsto \bar{\phi} e^{-i\theta}$ , которая оставляет действие инвариантным. По теореме Нётер, этой симметрии должен соответствовать некий сохраняющийся ток  $J_\mu$ , так что  $\partial_\mu J_\mu = 0$ . Выпишите явно выражения для компонент этого тока  $J_\mu = (Q, \mathbf{j})$ .

**Литература** [Зи, задача 1.8.3], [ПШ, задача 2.2]. Про теорему Нётер в теории поля можно почитать в [ПШ, глава 2.2].

## Лекция II

# «Вторичное квантование» теории Клейна-Гордона

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  $p^\mu$  и контравариантные  $p_\mu$  вектора). Наконец, мы, как всегда, работаем в god-given системе единиц  $\hbar = c = 1$ .

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

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{x} (\hat{\pi}^2(\mathbf{x}) + (\nabla\hat{\phi}(\mathbf{x}))^2 + m^2\hat{\phi}^2(\mathbf{x})), \quad [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\pi}(\mathbf{y})] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (\text{II.1})$$

Давайте попробуем найти спектр этого Гамильтониана, а заодно поучимся работать с квантовой теорией поля.

### Классические уравнения движения

Давайте вспомним, как мы решали квантовый гармонический осциллятор. Поскольку классические уравнения движения на  $x$  и  $p$  (и, как следствие, квантовые уравнения на соответствующие операторы) были линейными, мы смогли построить линейные комбинации — операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$  — с простыми коммутационными соотношениями и тривиальными уравнениями движения.

В нашем случае мы имеем дело с квадратичным действием (гамильтонианом) и, как следствие, с линейными уравнениями движения — поэтому для исследования квантовой теории поля крайне полезно изучить классические уравнения движения. 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. Классическое уравнение движения — уравнение Клейна-Гордона:

$$(\partial^2 + m^2)\phi(x) = 0 \quad (\text{II.2})$$

Это уравнение допускает следующие решения, которые носят название положительно- и отрицательно-частотных решений:

$$\phi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\mp iE_{\mathbf{p}}t + i\mathbf{p}\mathbf{x}}, \quad E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} \quad (\text{II.3})$$

Заметим, что связь частоты («энергии») и волнового вектора («импульса») воспроизводит релятивистский закон дисперсии для частиц массы  $m$ . Допустимые импульсы параметризуются тройкой произвольных целых чисел согласно  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = \left(\frac{2\pi}{L_x}n_x, \frac{2\pi}{L_y}n_y, \frac{2\pi}{L_z}n_z\right)$ ; при этом это исчерпывает все линейно-независимые решения (то есть такие решения образуют базис).

### Разложение по собственным модам

**Лирическое отступление** Полевые 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  $f(x) = \langle \psi_1 | \hat{\phi}(x) | \psi_2 \rangle$  являются самыми обыкновенными функциями, и эти функции уже можно раскладывать. Это, в свою очередь, означает, что *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.

Давайте теперь рассмотрим разложение по построенному набору:

$$\begin{cases} \hat{\phi}(x) &= \sum_{\mathbf{p}} \left( \hat{A}_{\mathbf{p}} \phi_{\mathbf{p}}^{(+)}(x) + \hat{B}_{\mathbf{p}} \phi_{\mathbf{p}}^{(-)}(x) \right) \\ \hat{\pi}(x) &= \partial_t \hat{\phi}(x) = \sum_{\mathbf{p}} (-i)\omega_{\mathbf{p}} \left( \hat{A}_{\mathbf{p}} \phi_{\mathbf{p}}^{(+)}(x) - \hat{B}_{\mathbf{p}} \phi_{\mathbf{p}}^{(-)}(x) \right) \end{cases} \quad (\text{II.4})$$

Поскольку коммутационные соотношения исходно даны для операторов в один и тот же момент времени, давайте положим  $t = 0$  и обратим это разложение:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{B}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2\sqrt{V}} \int d^3\mathbf{x} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} \left( \hat{\phi}(\mathbf{x}) \pm \frac{i}{E_{\mathbf{p}}} \hat{\pi}(\mathbf{x}) \right) \Rightarrow \hat{B}_{\mathbf{p}} = \hat{A}_{-\mathbf{p}}^\dagger \quad (\text{II.5})$$

(обратим внимание, что данное соотношение напрямую является следствием того, что поле  $\phi(\mathbf{x})$  — вещественное поле). Непосредственной проверкой можно легко убедиться в выполнении следующих коммутационных соотношений:

$$[\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{A}_{\mathbf{q}}] = [\hat{A}_{\mathbf{p}}^\dagger, \hat{A}_{\mathbf{q}}^\dagger] = 0, \quad [\hat{A}_{\mathbf{p}}, \hat{A}_{\mathbf{q}}^\dagger] = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \quad (\text{II.6})$$

Поэтому, введя определение  $\hat{A}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}} \hat{a}_{\mathbf{p}}$ , мы приходим к стандартной алгебре лестничных операторов. Таким образом, приведём для справочных целей (поскольку в будущем мы будем неоднократно к этому результату возвращаться) окончательный результат:

$$\begin{cases} \hat{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx}) \\ \hat{\pi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} (-i) \sqrt{\frac{E_{\mathbf{p}}}{2}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{-ipx} - \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{ipx}) \end{cases}, \quad [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \quad (\text{II.7})$$

Напомним, тут имеется в виду четыре-вектора  $x = (t, \mathbf{x})$  и  $p = (E_{\mathbf{p}}, \mathbf{p})$ , так что  $px = E_{\mathbf{p}}t - \mathbf{p}\mathbf{x}$ .

## Гамильтониан и квазичастицы

Подставим разложение в таком виде в гамильтониан. Достаточно прямолинейной выкладкой можно получить следующий ответ:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} \left( \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.8})$$

Этот гамильтониан представляет собой набор «осцилляторов» — 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  $n_{\mathbf{p}} = 0, 1, \dots$  (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  $|0\rangle$ .

## Энергия вакуума и ультрафиолетовые расходимости

Энергия основного состояния — вакуума — обладает, тем не менее, конечной энергией, которая складывается из энергии «нулевых колебаний»:

$$E_0 = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2} E_{\mathbf{p}} \quad (\text{II.9})$$

«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  $\Lambda$ , 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  $|p| < \Lambda$ .

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  $\Lambda$ ). 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 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  $|p| \rightarrow 0$ . 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.

## Литература

[ПШ, Глава 2.3 «Поле Клейна-Гордона как набор гармонических осцилляторов»], [Зи, Глава III.1 «Обрезание нашего незнания»]

# Задачи

## Упражнения

В этой серии упражнений мы рассматриваем вещественную теорию Клейна-Гордона.

1. Выпишите уравнения движения для операторов  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ ,  $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$ .
2. Определим одночастичное состояние с импульсом  $\mathbf{p}$  как  $|\mathbf{p}\rangle = \sqrt{2E_{\mathbf{p}}}\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger|0\rangle$ . Вычислите матричный элемент  $\langle 0|\hat{\phi}(x)|\mathbf{p}\rangle$ .
3. Какова нормировка таких состояний:  $\langle \mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle$  (обратите внимание, что она является Лоренц-инвариантной, с чем и связан выбор множителя  $\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}$ )? Как записать через эти состояния проектор на одночастичное подпространство  $\hat{\mathbb{1}}_{\text{одноч.}}$ ?
4. Используя коммутационные соотношения, покажите явно, что многочастичное состояние  $|\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n\rangle$  (определённое согласно п.2) является собственным для гамильтониана  $\hat{H}$ . Какое собственное число соответствует этому состоянию?

## Задача 1. Матрац

В этой задаче мы рассмотрим один из способов, как в физике возникает теория поля в качестве непрерывного предела некой иной теории. Рассмотрите одномерную цепочку из  $N$  атомов с периодическими граничными условиями, в гармоническом приближении («связанных пружинами»), описываемую следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \left( \frac{\hat{p}_n^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\hat{u}_n - \hat{u}_{n+1})^2}{2} \right), \quad \hat{u}_{N+1} \equiv \hat{u}_1 \quad (\text{II.10})$$

В положении равновесия расстояния между частицами равно  $a$ , так что  $x_n = na$ ; величины же  $u_n$  описывают отклонение  $n$ -того атома из положения равновесия.

1. Используя дискретное преобразование Фурье, перейдите к новым переменным — Фурье-компонентам  $u_k$  и  $p_k$ . Запишите в терминах этих переменных гамильтониан, а также выпишите коммутационные соотношения между ними.
2. Постройте их линейные комбинации, которые удовлетворяют стандартной лестничной алгебре, и в терминах которых гамильтониан имеет диагональный вид (представляет собой сумму независимых осцилляторов). Учтите, что в силу вещественности операторов  $\hat{u}_n$  и  $\hat{p}_n$ , их Фурье-гармоники  $\hat{u}_k$  и  $\hat{p}_k$  не являются независимыми динамическими переменными. Получите закон дисперсии квазичастиц в этой теории — фононов.
3. Теперь постройте непрерывный предел  $N \rightarrow \infty$ , считая длину цепочки  $L = Na$  фиксированной. Свяжите с отклонениями  $u_n$  и импульсами  $p_n$  канонически сопряжённые поля  $\phi(x)$  и  $\pi(x)$  так, чтобы между ними воспроизвелись коммутационные соотношения. Обратите внимание, что с точки зрения непрерывного предела хорошо определёнными являются термодинамические величины — *линейная плотность массы*  $\rho$ , и *скорость звука*  $c$ . Как они связаны с *микроскопическими параметрами*  $m$ ,  $\omega$ ,  $a$ ?
4. Покажите, что в непрерывном пределе теория описывается гамильтонианом  $\hat{H}$ , совпадающей с безмассовой теорией Клейна-Гордона. Запишите её в терминах термодинамических величин; проквантуйте полученную теорию, и получите закон дисперсии квазичастиц  $\omega_k$ . Сравните его с законом дисперсии, полученным исходя из точного решения исходной решёточной задачи.
5. Обсудите, как полученные результаты связать со словами про ультрафиолетовые расходимости в теориях поля, сказанными на лекции. Какова энергия вакуума этой теории?

**Литература** [ЛШ, задача 4]; [Зи, глава 1.3]

## Задача 2. Теория с зарядом

Продолжим рассмотрение комплексной теории Клейна-Гордона в размерности 3+1. Гамильтониан этой теории имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{x} (\hat{\pi}^\dagger \hat{\pi} + \nabla \hat{\phi}^\dagger \nabla \hat{\phi} + m^2 \hat{\phi}^\dagger \hat{\phi})$$

1. Не помещая систему в «ящик» (так что  $k$ -пространство не дискретно, и необходимо использовать непрерывное преобразование Фурье), проквантуйте эту теорию, перейдя к операторам рождения и уничтожения. В случае непрерывного  $k$ -пространства, коммутационные соотношения должны иметь вид  $[\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger] = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{q})$ . Обратите внимание, что, в отличие от вещественного случая, условия  $\phi = \phi^\dagger$  нет; это удваивает количество степеней свободы теории, и вам необходимо будет ввести два набора операторов  $\hat{a}_{\mathbf{p}}$  и  $\hat{b}_{\mathbf{p}}$ , в терминах которых гамильтониан должен иметь по-прежнему диагональный вид.
2. В предыдущем задании вы получили Нётеровский ток, соответствующий непрерывной  $U(1)$  симметрии задачи:

$$J_\mu = i(\phi^* \partial_\mu \phi - \phi \partial_\mu \phi^*), \quad \partial_\mu J_\mu = 0$$

Сохранение этого тока, в частности, означает сохранение величины электрического заряда

$$\hat{Q} = \int d^3 \mathbf{x} J_0 = i \int d^3 \mathbf{x} (\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\pi}^\dagger(\mathbf{x}) - \hat{\pi}(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x})) = \text{const}$$

Выразите величину  $\hat{Q}$  через операторы рождения и уничтожения. Покажите, чему равны заряды частиц в этой теории.

**Литература** [ПШ, глава 2, задача 2.2]

### Задача 3\*. Эффект Казимира

Не смотря на то, что в теории Клейна-Гордона энергия вакуума ультрафиолетово расходится, тем не менее с ней связан наблюдаемый (и вычисляемый в рамках теории) результат — а именно, эффект Казимира. Сам эффект проявляется в взаимном притяжении двух пластин, помещённых в вакуум на конечном расстоянии  $l$  друг от друга.

1. Рассмотрите безмассовую  $m = 0$  теорию Клейна-Гордона в пространстве размерности  $d + 1$ ; при этом предположите, что система находится между парой параллельных пластин, находящихся на расстоянии  $l$  друг от друга, и на которых поле зануляется. Используя периодические граничные условия вдоль остальных направлений, получите выражение для энергии нулевых колебаний такой системы  $E(l)$ . Обратите внимание, что это выражение ультрафиолетово расходится.
2. Теперь рассмотрите большую систему размера  $L_1 \times L_2 \times \dots \times L_d$ , в которую внесли пару непроницаемых плоскостей, перпендикулярных пространственной оси  $d$ , и расстояние между которыми равно  $l \ll L_d$ . Поле теперь, вообще говоря, может находиться как между плоскостями, так и снаружи, поэтому энергия такой системы будет равна  $E(l) + E(L_d - l)$ . Поскольку энергия системы явно зависит от  $l$ , то между плоскостями будет иметь место взаимодействие с конечной силой  $F = \frac{\partial}{\partial l}(E(l) + E(L_d - l))$ . Поскольку сила окажется пропорциональной поперечной площади сечения  $A = L_1 \times \dots \times L_{d-1}$ , то осмысленной величиной является давление  $P = \frac{F}{A}$ , которое пластины оказывают друг на друга. Это давление уже не расходится ультрафиолетово и его оказывается возможным вычислить в рамках теории.
3. Рассмотрите случай  $d = 1$ , используя экспоненциальную регуляризацию — а именно, вводя во все ультрафиолетово расходящиеся величины множитель  $\exp(-|p|/\Lambda)$ . Вычислите явно величину  $E(l)$ , а также давление  $P$ . Покажите, что последнее остаётся конечным в пределе  $\Lambda \rightarrow \infty$ .
4. Используя *размерную регуляризацию*, вычислите величину  $E(l)$  и  $F$  в пространстве произвольной размерности  $d$ . В частности, вычислите её при  $d = 1, 2, 3$ .

5\*\*. Исследуйте эффект Казимира для массивного поля  $m \neq 0$ , считая при этом  $ml \gg 1$ .

В трёхмерье вы должны получить ответ в два раза меньший, чем изложенный в Википедии. Это связано с тем, что в нашем мире эффект Казимира вызван энергией вакуума электромагнитного поля, которое вовсе не описывается теорией Клейна-Гордона. В частности, у фотонов имеются две допустимых *поляризации* — то есть в два раза больше степеней свободы.

**Литература** [Зи, глава 1.8 «Эффект Казимира»]

## Лекция III

# Многочастичная квантовая механика и вторичное квантование

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:

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

На этой лекции мы построим удобный аппарат, позволяющий работать с подобными системами тождественных частиц — аппарат, базирующийся на идеях квантовой теории поля.

### Тождественность частиц

Квантовая механика учит нас, 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:

$$\begin{cases} \Psi^{(F)} \\ \Psi^{(B)} \end{cases} (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \equiv \begin{cases} \text{sign} \sigma \\ 1 \end{cases} \cdot \Psi(\mathbf{x}_{\sigma_1}, \mathbf{x}_{\sigma_2}, \dots, \mathbf{x}_{\sigma_N}), \quad \forall \sigma \in S_N \quad (\text{III.2})$$

( $\sigma$  — 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 в нём мы обычно работаем.

### Симметризация

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 прямолинейно<sup>5</sup>:

$$\begin{cases} \Psi^{(F)} \\ \Psi^{(B)} \end{cases} (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_{\sigma \in S_N} \begin{cases} \text{sign} \sigma \\ 1 \end{cases} \psi_{\sigma_1}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{\sigma_N}(\mathbf{x}_N) \quad (\text{III.3})$$

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

$$\Psi^{(F)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \det \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}_1) & \psi_1(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_1(\mathbf{x}_N) \\ \psi_2(\mathbf{x}_1) & \psi_2(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_2(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\mathbf{x}_1) & \psi_N(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_N(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix} \quad (\text{III.4})$$

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*.

<sup>5</sup>Будучи так записанной, волновая функция не нормирована

## Построение базиса в $\mathcal{F}_N$

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  $\lambda_n$  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:

$$\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \lambda_1, \dots, \lambda_N \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \Psi_{\lambda_1 \dots \lambda_N}^{(F)} \\ \Psi_{\lambda_1 \dots \lambda_N}^{(B)} \end{cases} (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \left\{ \frac{1}{\sqrt{N!}} \right\} \sum_{\sigma \in S_N} \begin{cases} \text{sign} \sigma \\ 1 \end{cases} \psi_{\lambda_{\sigma_1}}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{\lambda_{\sigma_N}}(\mathbf{x}_N) \quad (\text{III.5})$$

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  $\lambda$  повторяется (за что отвечают числа  $n_\lambda$ ). Если в фермионном случае какая-то из  $\lambda$  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  $\lambda_n$ , то получится (с точностью до  $\pm 1$ ) точно такая же волновая функция. Если мы выбросим все такие совпадения — например, будем рассматривать упорядоченные по неубыванию наборы<sup>6</sup> — 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  $\lambda$  встречается в наборе. Такое представление носит название *представления чисел заполнения*, а волновые функции в этом представлении обозначаются следующим образом:

$$|n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N\rangle \quad (\text{III.6})$$

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

## Операторы рождения и уничтожения частиц

### Пространство Фока и вакуум

Даже если мы работаем с фиксированным числом частиц  $N^7$ , 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  $|0\rangle$ . 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  $\hat{a}_\lambda^\dagger : \mathcal{F}_i \mapsto \mathcal{F}_{i+1}$  и  $\hat{a}_\lambda : \mathcal{F}_{i+1} \mapsto \mathcal{F}_i$ . 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:

$$\hat{a}_\lambda^\dagger |\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} |\lambda, \lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle, & \lambda \notin \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \\ 0, & \lambda \in \{\lambda_1, \dots, \lambda_N\} \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

(таким образом, он дописывает  $\lambda$  в начало — *рождает* частицу в состоянии  $\lambda$ ). Если вспомнить, что эти волновые функции антисимметричны по произвольной перестановке двух  $\lambda$ , то видно, что произвольные операторы  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  и  $\hat{a}_\lambda^\dagger$ , *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  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  действует на волновые функции в представлении чисел заполнения — достаточно вспомнить, что после добавления  $\lambda$  в начало необходимо упорядочить набор. При перестановке двух соседних  $\lambda_n$  меняется знак волновой

<sup>6</sup>Для этого, вообще говоря, квантовые числа нужно тоже как-то упорядочить — сказать, какое из состояний идёт «раньше», а какое — «позже». В дальнейшем мы увидим, что от этого порядка, впрочем, ничего не зависит

<sup>7</sup>А 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:

$$\hat{a}_\lambda^\dagger |n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum_{k=1}^{\lambda-1} n_k} |n_1, \dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle, & n_\lambda = 0 \\ 0, & n_\lambda = 1 \end{cases} \quad (\text{III.8})$$

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:

$$\hat{a}_\lambda |n_1, \dots, n_\lambda, \dots\rangle = \begin{cases} 0, & n_\lambda = 0 \\ (-1)^{\sum_{k=1}^{\lambda-1} n_k} |n_1, \dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle, & n_\lambda = 1 \end{cases} \quad (\text{III.9})$$

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

$$\{\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger\} = \{\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu\} = 0, \quad \{\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu^\dagger\} = \delta_{\lambda\mu}. \quad (\text{III.10})$$

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  $\hat{n}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda$ :

$$\hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle = \begin{cases} 0, & n_\lambda = 0 \\ |\dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle, & n_\lambda = 1 \end{cases} \equiv n_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle \quad (\text{III.11})$$

## Бозоны

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

$$\begin{cases} \hat{a}_\lambda^\dagger |\dots, n_\lambda, \dots\rangle & \equiv_{def} \sqrt{n_\lambda + 1} |n_1, \dots, n_\lambda + 1, \dots\rangle \\ \hat{a}_\lambda |\dots, n_\lambda, \dots\rangle & \equiv_{def} \sqrt{n_\lambda} |n_1, \dots, n_\lambda - 1, \dots\rangle \end{cases} \quad (\text{III.12})$$

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

$$[\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger] = [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu] = 0, \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu^\dagger] = \delta_{\lambda\mu} \quad (\text{III.13})$$

(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). При этом оператор же числа частиц в состоянии  $\lambda$  опять выглядит как  $\hat{n}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda$ .

## 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:

$$|\lambda'\rangle = \hat{a}_{\lambda'}^\dagger |0\rangle \equiv \sum_\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | \lambda'\rangle = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \langle \lambda | \lambda'\rangle |0\rangle \quad (\text{III.14})$$

Следовательно, если мы захотим работать в ином базисе, преобразование операторов рождения и уничтожения происходит следующим образом<sup>8</sup>

$$\hat{a}_{\lambda'}^\dagger = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda^\dagger \langle \lambda | \lambda'\rangle, \quad \hat{a}_{\lambda'} = \sum_\lambda \hat{a}_\lambda \langle \lambda' | \lambda\rangle \quad (\text{III.15})$$

<sup>8</sup>Приведенное 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 рассуждение 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:

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_{\lambda} \hat{a}_{\lambda} \psi_{\lambda}(\mathbf{x}), \quad \hat{a}_{\lambda} = \int \hat{\psi}(\mathbf{x}) \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (\text{III.16})$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \psi_{\lambda}^*(\mathbf{x}), \quad \hat{a}_{\lambda}^\dagger = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \psi_{\lambda}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (\text{III.17})$$

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{y})]_{\mp} = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (\text{III.18})$$

Эти тождества подводят нас вплотную к квантовой теории поля.

## Вторичное квантование

Пусть имеется какой-то одночастичный эрмитов оператор  $\hat{O} : \mathcal{F}_1 \mapsto \mathcal{F}_1$ , со спектром  $\{o_{\lambda}\}$  и собственными функциями  $\psi_{\lambda}(\mathbf{x})$ . В многочастичном случае, типично, мы работаем с операторами  $\hat{O} : \mathcal{F}_N \mapsto \mathcal{F}_N$  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:

$$\hat{O} |n_1, \dots, n_{\lambda}, \dots\rangle = \sum_{\lambda} n_{\lambda} o_{\lambda} |n_1, \dots, n_{\lambda}, \dots\rangle = \sum_{\lambda} o_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\lambda} |n_1, n_2, \dots\rangle \Rightarrow \hat{O} = \sum_{\lambda} o_{\lambda} \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\lambda} \quad (\text{III.19})$$

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

$$\hat{O} = \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | \hat{O} | \mu \rangle \hat{a}_{\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mu} \quad (\text{III.20})$$

(при этом  $\langle \lambda | \hat{O} | \mu \rangle$  — обычный матричный элемент, взятый по *одночастичным* волновым функциям). Это тождество можно записать и в случае непрерывного спектра:

$$\hat{O} = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{O} \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (\text{III.21})$$

(при этом оператор  $\hat{O}$  в правой части нужно понимать как его координатное представление — то есть оператор, действующий на координатную зависимость  $\psi$ -оператора<sup>9</sup>). 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:

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}_0) = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_0) \hat{\psi}(\mathbf{x}_0) \quad (\text{III.22})$$

Другой пример — гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = \sum_n \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\mathbf{x}_i) \right) \equiv \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) \right] \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (\text{III.23})$$

<sup>9</sup>Такой 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  $\nabla \hat{\psi}(\mathbf{x})$ .

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

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_1) \quad (\text{III.24})$$

## Литература

[AltlandSimons, Глава 2.1 «Introduction to second quantization»], [ЛЛЗ, Глава 9 «Тождественность частиц»]

# Задачи

## Упражнения

В этом наборе упражнений мы покажем, как устроены одночастичные и многочастичные волновые функции на языке вторичного квантования. Для решения этих задач достаточно использовать только коммутационные соотношения  $[\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})]_{\mp} = \hat{\psi}(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) \mp \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y})\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ , а также тот факт, что  $\hat{\psi}(\mathbf{x})|0\rangle = 0$ . Во всех упражнениях исследуйте обе статистики — Бозе и Ферми.

1. Как записать элементы одночастичного координатного базиса  $|\mathbf{x}\rangle$  и двухчастичного базиса  $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$  в представлении вторичного квантования? Как выглядит нормировка этих состояний  $\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle$  и  $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2|\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2\rangle$ ? Как записывается проектор на одночастичное  $\hat{\mathbb{P}}(\mathcal{F}_1)$  и двухчастичное  $\hat{\mathbb{P}}(\mathcal{F}_2)$  подпространства через эти вектора?
2. Пусть состояние  $|\psi_1\rangle$  описывается некой известной одночастичной волновой функцией  $\psi_1(\mathbf{x})$ . Как его записать на языке вторичного квантования? Покажите непосредственным вычислением, что  $\langle \mathbf{x}|\psi_1\rangle = \psi_1(\mathbf{x})$ .
3. Теперь по аналогии рассмотрите двухчастичное состояние, в котором одна частица находится в состоянии  $\psi_1(\mathbf{x})$ , а вторая — в состоянии  $\psi_2(\mathbf{x})$ , ортогональном  $\psi_1$ . Покажите непосредственным вычислением, что при этом соответствующая координатная волновая функция  $\psi_{12}(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2|\psi_1, \psi_2\rangle$  представляет собой детерминант Слэтера в случае, если  $\psi$ -операторы образуют фермионную алгебру, и соответствующую симметричную комбинацию если алгебра бозонная. Отнормируйте это состояние:  $\langle \psi_1, \psi_2|\psi_1, \psi_2\rangle = 1$ .
4. Подействовав оператором двухчастичного взаимодействия

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_1) \quad (\text{III.25})$$

на базисное состояние  $|\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\rangle$ , докажите эквивалентность этого оператора соответствующему оператору в представлении первичного квантования:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m) \quad (\text{III.26})$$

5. Рассмотрите среднее значение оператора  $\hat{V}$  по состоянию  $|\psi_1, \psi_2\rangle$ . Покажите, что при этом получается два члена, первый из которых имеет смысл классического взаимодействия плотностей («член Хартри»), а второй не имеет классической интерпретации, и к тому же зависит от статистики («член Фока», или же «обменный член»).

## Задача 1. Флуктуации числа фермионов

Рассмотрим одномерную систему  $N$  бесспиновых фермионов, живущих на одномерной отрезке большой длины  $L$  с периодическими граничными условиями (для всей задачи подразумевается термодинамический предел  $L \rightarrow \infty$  при фиксированной концентрации частиц  $n = \frac{N}{L}$ ; поэтому все поправки вида  $\sim \frac{1}{N}$  можно с чистой совестью выбрасывать). Гамильтониан такой системы имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{el} = \int_0^L dx \hat{\psi}^\dagger(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \hat{\psi}(x), \quad \int_0^L \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) = N = \text{const} \quad (\text{III.27})$$

1. Используя преобразование Фурье, диагонализуйте гамильтониан  $\hat{H}_{el}$  — приведите его к виду невзаимодействующих «фермионных осцилляторов»  $\hat{H}_{el} = \sum_p \epsilon_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p$ , с коммутационными соотношениями  $\{\hat{c}_p, \hat{c}_q^\dagger\} = \delta_{pq}$ . Какой закон дисперсии полученных квазичастиц  $\epsilon_p$ ?
2. Покажите, что основное состояние  $|\Omega\rangle$  такой системы соответствует заполненной ферми-сфере, а именно —  $|\Omega\rangle = \prod_{|p| < p_F} \hat{c}_p^\dagger |0\rangle$  (что в представлении чисел заполнения соответствует состоянию с  $n_{k < k_F} = 1$  и  $n_{k > k_F} \equiv 0$ ). Свяжите величину граничного импульса Ферми  $p_F$  с концентрацией частиц  $n$  из условия, что полное число частиц, которое записывается следующим образом:

$$\hat{N} = \int_0^L dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) = \sum_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p, \quad (\text{III.28})$$

равно  $\langle \hat{N} \rangle = N$  (квантомеханическое среднее по состоянию  $\Omega$ ). Вычислите энергию Ферми  $E_F = \frac{p_F^2}{2m}$ , а также энергию основного состояния в пересчёте на одну частицу  $\epsilon = \frac{1}{N} \langle \hat{H} \rangle$ .

3. Обратите внимание, что для состояний с  $p < p_F$  можно формально ввести операторы рождения и уничтожения *дырок*, согласно определению  $\hat{a}_p \equiv \hat{c}_p^\dagger$  и  $\hat{a}_p^\dagger \equiv \hat{c}_p$ ; при этом алгебра новых операторов точно такая же<sup>10</sup>. При этом основное состояние  $|\Omega\rangle$  в терминах новых частиц будет совпадать с вакуумом  $|0\rangle$  (быть может, с точностью до несущественной фазы). Перепишите гамильтониан  $\hat{H}$ , а также  $\psi$ -операторы, в терминах новых операторов. Нарисуйте закон дисперсии новых квазичастиц.
4. Рассмотрите отрезок конечной (но достаточно большой) длины  $p_F^{-1} \ll l \ll L$ . Оператор числа частиц на этом отрезке записывается следующим образом:

$$\hat{n} = \int_0^l dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \quad (\text{III.29})$$

Вычислите флуктуацию числа фермионов на этом отрезке  $\delta n^2 = \langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2$ .

5. Пусть теперь имеется такой-же *классический* газ, и каждая из частиц независимо от остальных равномерно распределена по всему объему. Найдите полную функцию распределения числа частиц в маленьком отрезке длины  $l$ ; вычислите флуктуацию этого числа  $\delta n^2$ . Сравните полученные ответы.

**Литература** [ЛШ, глава 5 «идеальный Ферми-газ», задача 26]

## Задача 2. Фриделевские осцилляции

Рассмотрите одномерный Ферми-газ из предыдущей задачи, по-прежнему помещённый в термодинамически большой «ящик», но на сей раз этот ящик моделируется бесконечными стенками в точках  $x = 0$  и  $x = L$  (тем самым, граничные условия — нулевые вместо периодических).

1. Диагонализуйте гамильтониан, перейдя к базису собственных состояний одночастичного гамильтониана — стоячим волнам; определите, как устроено основное состояние  $|\Omega\rangle$ . Хотя импульс не является теперь хорошим квантовым числом, поскольку трансляционная инвариантность нарушена границами; однако модуль импульса — является, поэтому по-прежнему можно говорить об импульсе Ферми  $p_F$ . Покажите, что он связан с концентрацией частиц  $n$  точно таким же выражением, как и в случае периодических граничных условий.
2. Вычислите распределение плотности газа вблизи стенки в термодинамическом пределе (то есть  $x \ll L$ ). Оно даётся следующей величиной:

$$\rho(x) = \langle \hat{\rho}(x) \rangle = \langle \Omega | \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) | \Omega \rangle \quad (\text{III.30})$$

Hint: возможно, вам опять покажется удобным «частично-дырочное» представление для  $\psi$ -операторов.

**Литература** [ЛШ, глава 2 «Функция Грина», задача 8]

<sup>10</sup>Такой трюк работает только в случае статистики Ферми!

## Лекция IV

# Модели сильной связи и графен

### 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:

$$\forall m_i \in \mathbb{Z} \mapsto f\left(\mathbf{r} + \sum_i m_i N_i \mathbf{a}_i\right) \equiv f(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.1})$$

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:

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} f_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (\text{IV.2})$$

с следующими обозначениями:

$$\sum_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \equiv \sum_{n_1=0}^{N_1-1} \dots \sum_{n_d=0}^{N_d-1} f(n_1 \mathbf{a}_1 + \dots + n_d \mathbf{a}_d), \quad \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \equiv \sum_{k_1=0}^{N_1-1} \dots \sum_{k_d=0}^{N_d-1} f\left(\frac{k_1}{N_1} \mathbf{G}_1 + \dots + \frac{k_d}{N_d} \mathbf{G}_d\right) \quad (\text{IV.3})$$

Они согласованы благодаря выполнению следующих условий:

$$\sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = N\delta_{\mathbf{k},0}, \quad \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = N\delta_{\mathbf{k},0} \quad (\text{IV.4})$$

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.

### Модели сильной связи

Пусть электрон движется в периодической решётке, составленной из каких-то притягивающих центров (атомов), образующих периодический потенциал:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_n U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad (\text{IV.5})$$

( $\mathbf{r}_n$  — координаты центра  $n$ -того атома; и  $\mathbf{r}_n$  образуют какую-то периодическую структуру — решётку). Пусть при этом в потенциале отдельного атома  $U_0(\mathbf{r})$  имеется спектр,  $\langle r|n\rangle = \psi_n^{(0)}(\mathbf{r})$  с (отрицательными) уровнями энергий  $-\varepsilon_n$ . Для простоты, мы будем рассматривать случай, когда уровень энергии один. Поскольку потенциальная энергия  $U_0(\mathbf{r} \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ , то на большом расстоянии волновая функция затухает 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:  $\int d\mathbf{r} \psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) \sim \exp(-|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|/a_B)$ .

Наивно, если предположить, что эти перекрытия вообще равны нулю — то мы тем самым имеем дело с  $N$  невзаимодействующими атомами. Состояния  $\langle \mathbf{r} | n^{(0)} \rangle = \psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$  образуют ортонормированный базис, и имеется  $N$ -кратно вырожденный уровень энергии  $-\epsilon$ . Если же учесть экспоненциально малое перекрытие, то это 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.

### Блоховские волновые функции

К этой задаче можно подойти с другой стороны — стандартный способ решения задач о движении в периодическом потенциале. Гамильтониан коммутирует с операторами конечных трансляций  $[\hat{H}, \hat{T}_\mathbf{a}] = 0$ , поэтому можно искать собственные функции гамильтониана в виде собственных функций оператора конечных трансляций. Последние называются *Блоховскими волновыми функциями*, и устроены следующим образом:

$$\hat{T}_\mathbf{a} |\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} |\mathbf{k}\rangle \Rightarrow \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}\rangle = u_\mathbf{k}(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{H} |\mathbf{k}\rangle = \epsilon(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle \quad (\text{IV.6})$$

(функция  $u_\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \equiv u_\mathbf{k}(\mathbf{r})$  является периодической, и в общем случае зависит от  $\mathbf{k}$  и определяется явным видом потенциала  $U_0$ ). 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:

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle \equiv \int d\mathbf{r} u_\mathbf{k}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Rightarrow \int d\mathbf{r} |u_\mathbf{k}(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (\text{IV.7})$$

### Состояния Ванье (Wannier states)

В рамках приближения сильной связи достаточно очевидно, что функция  $u_\mathbf{k}(\mathbf{r})$  должна быть существенно отлична от нуля только в окрестности притягивающих центров (в классически разрешённой области). Более того, в пределе  $a \rightarrow \infty$  она, вообще говоря, тождественно совпадает с волновой функцией на отдельном атоме, и поэтому мы ожидаем, что она изменяется *экспоненциально слабо*. Поэтому, если сделать теперь преобразование Фурье:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_n} \Rightarrow \langle \mathbf{r} | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} u_\mathbf{k}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)} \equiv \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (\text{IV.8})$$

то полученные функции будут *экспоненциально слабо* отличаться от  $\psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ . Однако, в отличие от последних, они будут образовывать *ортонормированную систему*, в чём можно убедиться непосредственно:

$$\langle n | m \rangle \equiv \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r} u_\mathbf{k}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)} u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)} = \delta_{nm} \quad (\text{IV.9})$$

Такие состояния называются *состояниями Ванье*.

### Гамильтониан сильной связи

В самом общем виде, гамильтониан в базисе состояний Ванье записывается следующим образом (знак минус — это договорённость):

$$\hat{H} = - \sum_{ij} t_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (\text{IV.10})$$

Что можно сказать про матричные элементы  $t_{ij}$  (*туннельные матричные элементы*)? Во-первых, в силу оставшейся трансляционной симметрии, они зависят только от расстояния между атомами  $t_{ij} \equiv t(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ . Во-вторых, поскольку  $t_{ij} = -\langle i | \hat{H} | j \rangle$ , и состояния Ванье близки к исходным состояниям  $\psi^{(0)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ , то такие матричные элементы должны спадать с расстоянием как  $t_{ij} \sim \exp(-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/a_B)$ . Наконец, диагональные элементы можно записать отдельно, и они, очевидно, близки к исходному уровню энергии  $\epsilon$ . Это позволяет проводить суммирование лишь по парам ближайших соседей:

$$\hat{H} \simeq -\epsilon \sum_i |i\rangle \langle i| - t \sum_{\langle ij \rangle} (|i\rangle \langle j| + |j\rangle \langle i|) \quad (\text{IV.11})$$

(тут мы явно отразили эрмитовость гамильтониана). Это и называется гамильтонианом сильной связи, или *прыжковым гамильтонианом*. Он записывается в ортогональном базисе состояний Ванье, и в нём учитываются только *прыжки на ближайших соседей* (*nearest neighbor hopping*)<sup>11</sup>, в чём и является суть приближения сильной связи. В принципе, можно было бы учесть и *прыжки на дальних соседей* (*next-nearest neighbor hopping*), но они будут экспоненциально подавлены по параметру  $\exp(-a/a_B)$ .

## 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  $\{\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger\} = \delta_{nm}$ <sup>12</sup>. Гамильтониан же, переписанный через эти состояния, будет иметь следующий вид:

$$\hat{H} = -\epsilon \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n - t \sum_{\langle nm \rangle} (\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m + \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n), \quad \{\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger\} = \delta_{nm} \quad (\text{IV.12})$$

## Пример: одномерная задача

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

$$\hat{H} = -\epsilon \sum_n |n\rangle \langle n| - t \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|) = - \begin{pmatrix} \epsilon & t & 0 & 0 & 0 & \dots \\ t & \epsilon & t & 0 & 0 & \dots \\ 0 & t & \epsilon & t & 0 & \dots \\ 0 & 0 & t & \epsilon & t & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & t & \epsilon & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{IV.13})$$

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 —  $\epsilon$  и  $t$  (на самом деле  $\epsilon$  задаёт лишь общий сдвиг энергии, и в этом смысле совершенно несущественно). Из состояний Ванье можно собрать Блоховские состояния:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} |n\rangle \quad (\text{IV.14})$$

$$\hat{H} |k\rangle = \epsilon_k |k\rangle, \quad \epsilon_k = -\epsilon - 2t \cos ka \quad (\text{IV.15})$$

( $a$  — 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 косинусом<sup>13</sup>!

То же можно сделать и на языке вторичного квантования:

$$\hat{H} = -\epsilon \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n - t \sum_n (\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n+1} + \hat{a}_{n+1}^\dagger \hat{a}_n), \quad \{\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger\} = \delta_{nm} \quad (\text{IV.16})$$

Проводя преобразование Фурье:

$$\hat{a}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \hat{a}_n e^{-ikn}, \quad \hat{a}_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \hat{a}_n^\dagger e^{ikn} \Rightarrow \{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \quad (\text{IV.17})$$

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (\text{IV.18})$$

<sup>11</sup>Название «прыжкового гамильтониана» связано с простым наблюдением: если исходно электрон находился на узле  $|i\rangle$ , то после действия гамильтониана  $\hat{H} |i\rangle$  он «перепрыгнет» на соседние с «амплитудой»  $t$ . Поэтому  $t$  также называют *амплитудой перескока*.

<sup>12</sup>Конечно же, модель сильной связи можно записать и для бозонов

<sup>13</sup>Это, конечно, можно продемонстрировать на примере той же Дираковской гребёнки явно



# Графен

## Геометрия

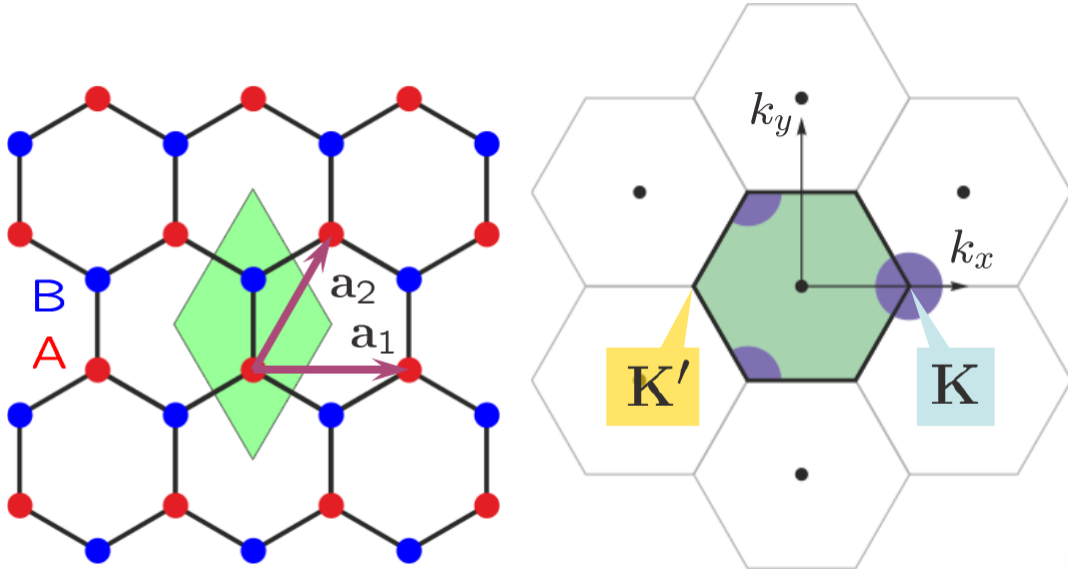
Графен представляет собой двумерный кристалл из атомов углерода с решёткой типа “медовые соты” (honeycomb lattice). Решётка представляет собой 2 вложенные треугольные решетки Браве — элементарная ячейка состоит из двух атомов; а базисные вектора можно выбрать в виде ( $a$  — длина ребра шестиугольника):

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} a, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 3/2 \end{pmatrix} a \quad (\text{IV.19})$$

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

$$\mathbf{G}_1 = \frac{4\pi}{3a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.20})$$

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).



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

Рис. 1: Решётка графена

## 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:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \rangle} (\hat{a}_{\mathbf{r}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_2} + h.c.) \quad (\text{IV.21})$$

(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:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} a, \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \begin{pmatrix} -\sqrt{3}/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} a \quad (\text{IV.22})$$

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

$$\hat{H} = -t \sum_{\mathbf{r}, \delta} (\hat{a}_{\mathbf{r}, A}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}+\delta, B} + h.c.) \quad (\text{IV.23})$$

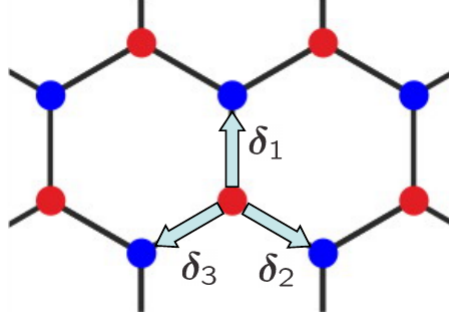


Рис. 2: Направления на ближайшие соседи

Только после перехода к суммированиям по ячейкам, мы можем провести дискретное преобразование Фурье (IV.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 гамильтониану следующего вида:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}, \beta}, \quad H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \equiv -t \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad f_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta} \quad (\text{IV.24})$$

(по повторяющимся индексам проводится суммирование). Это — почти диагональный вид; для того, чтобы привести гамильтониан к диагональному виду, нужно теперь провести иное 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: то мы придём к явно диагональному гамильтониану вида

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

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

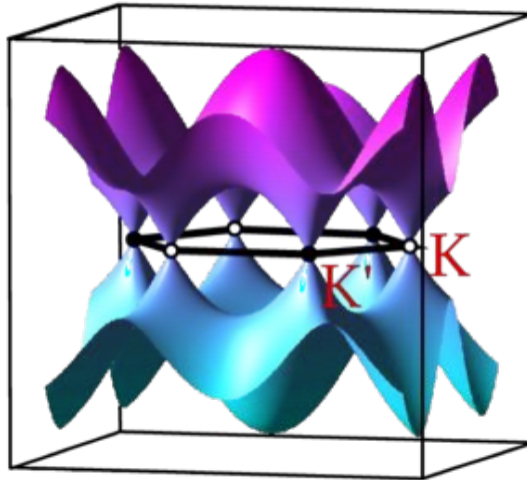


Рис. 3: Спектр графена  $E_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$

## 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 не число атомов!). 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 тривиально-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:

$$\hat{a}_{\mathbf{k},K} \equiv \hat{a}_{\mathbf{K}+\mathbf{k}}, \quad \hat{a}_{\mathbf{p},K'} = \hat{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{K}',i} \quad (\text{IV.25})$$

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  $\delta$ :

$$f_{\mathbf{K}+\mathbf{p}} \equiv \exp(ip_y a) + e^{i\frac{2\pi}{3}} \exp\left(i\frac{\sqrt{3}}{2}p_x a - i\frac{1}{2}p_y a\right) + e^{-i\frac{2\pi}{3}} \exp\left(-i\frac{\sqrt{3}}{2}p_x a - i\frac{1}{2}p_y a\right) \approx -\frac{3a}{2}(p_x - ip_y) \quad (\text{IV.26})$$

$$H_{\alpha\beta}^{(K)}(\mathbf{p}) \equiv -t \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{K}+\mathbf{p}} \\ f_{\mathbf{K}+\mathbf{p}}^* & 0 \end{pmatrix} \approx v \cdot \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \equiv v(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{p}), \quad v \equiv \frac{3}{2}ta \quad (\text{IV.27})$$

(тут матрицы  $\sigma_i$  — 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:

$$\hat{H}^{(K)} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p},\alpha}^\dagger v(\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{p}) \hat{a}_{\mathbf{p},\beta} \quad (\text{IV.28})$$

Нужно иметь в виду, 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 возбуждений  $v = \text{const}$ . 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):

$$\sum_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) \mapsto \int \frac{d^2\mathbf{r}}{S_0} f(\mathbf{r}), \quad S_0 = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2 \quad (\text{IV.29})$$

- 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  $S = S_0 N$  — площадь всего листа графена):

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{S}} \int d^2\mathbf{r} \hat{\psi}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (\text{IV.30})$$

(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:

$$\frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \equiv f(-i\nabla) \frac{1}{S} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} = f(\hat{\mathbf{p}}) \delta(\mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\nabla \quad (\text{IV.31})$$

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

$$\hat{H}^{(K)} = \int d^2\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) v(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.32})$$

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  $\alpha$  (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  $\sigma$  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  $\hat{\psi}$  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 решётку<sup>14</sup>. 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:

$$\hat{H}^{(K)} = v(\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}}), \quad (\text{IV.33})$$

и в одночастичной задаче  $\hat{\mathbf{p}}$  будет уже являться настоящим квантомеханическим оператором. Волновые функции, на которые будет действовать этот оператор, будут представлять собой псевдоспиноры, 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  $\Lambda \sim 1/a$ .

<sup>14</sup>В 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.

# Задачи

## Упражнения

**Упражнение 1.** Выведите гамильтониан для электронов из долины  $K'$ .

**Упражнение 2.** Выпишите волновые функции электронов с импульсом  $\mathbf{p}$  из долины  $K$  (то есть полный квазиимпульс равен  $\mathbf{K} + \mathbf{p}$ ).

**Упражнение 3.** Реальные значения туннельного матричного элемента для графена равно  $t \simeq 3.11 \text{ эВ}$ , а постоянная решётки равна  $a \simeq 1.42 \text{ \AA}$ . Чему равна групповая скорость электронов? До каких температур низкоэнергетическое приближение оправдано?

## Задача 1. Одномерная модель

Рассмотрите одномерный прыжковый гамильтониан на цепочке длины  $L$  из  $N$  узлов, с периодическими граничными условиями:

$$\hat{H} = -t \sum_n (\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n+1} + h.c.) \quad (\text{IV.34})$$

1. Диагонализуйте гамильтониан, введя операторы рождения и уничтожения частиц с фиксированным квазиимпульсом,  $\hat{a}_k$  и  $\hat{a}_k^\dagger$ . Найдите закон дисперсии квазичастиц.
2. Пусть эта система описывает бесспиновые фермионы, концентрация которых  $n$ . Покажите, что основное состояние соответствует заполнению состояний с  $k \in (-k_F, k_F)$ . Как «Ферми-импульс»  $k_F$  связан с  $n$ ?
3. Низкоэнергетические возбуждения возникают вблизи Ферми-точек, и представляют собой частицы движущиеся влево (вблизи  $-k_F$ ) и вправо (вблизи  $k_F$ ). Введите поля  $\hat{\psi}(x) = (\hat{\psi}_L(x), \hat{\psi}_R(x))$ , и постройте низкоэнергетическую теорию поля.

## Задача 2. Klein paradox

Рассмотрите электрон, движущийся в графене в долине  $K$  с гамильтонианом  $\hat{H} = v(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})$ . На лист графена напылён потенциальный барьер, описываемый следующим потенциалом:

$$V(x, y) = \begin{cases} V_0, & x \in [-D/2, D/2] \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \quad (\text{IV.35})$$

(плавный потенциал — считая  $D \gg a$  — одинаково действует на подрешётки  $A$  и  $B$ ). Пусть электрон с энергией  $E > 0$  налетает по нормали на ступеньку. Найдите коэффициенты прохождения  $T$  и отражения  $R$ .

## Задача 3. Поглощение света

На лист графена по нормали к нему падает плоско-поляризованная электромагнитная волна частоты  $\omega_0$ . Исследуйте поглощение электромагнитного излучения графеном.

1. Электромагнитное поле — калибровочное, поэтому взаимодействие с электронами описывается стандартным образом, путём замены импульса  $\hat{\mathbf{p}}$  на «ковариантную производную»  $\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ , и  $\mathbf{A}$  — вектор-потенциал. Выпишите вектор-потенциал, описывающий такую задачу (в калибровке Вейля  $\varphi = 0$ ).
2. Используя золотое правило Ферми, вычислите поглощение энергии листом графена  $\frac{dE_{abs}}{dt}$ . Используйте тот факт, что единственный способ выполнить закон сохранения энергии и импульса — это переброска электрона из заполненной валентной зоны (ветви спектра  $E_{\mathbf{p}}^{(-)}$ ) в пустую зону проводимости (ветви спектра  $E_{\mathbf{p}}^{(+)}$ ). Учтите вырождения по спином и долинам. Полученная величина должна быть пропорциональна площади листа  $A^{15}$ , которая возникнет из-за суммирования по начальным состояниям.
3. Вычислите вектор Пойтинга падающей волны  $\mathcal{S}$ , и полное количество энергии, падающей на лист  $\frac{dE_{tot}}{dt} = \mathcal{S} \cdot \mathbf{A}$ . Найдите коэффициент поглощения  $c = \frac{dE_{abs}/dt}{dE_{tot}/dt}$ .

<sup>15</sup>Конечно, более осмыслена ситуация, когда на графен светят лазером с конечной площадью пятна  $A$ . Однако, покуда пятно макроскопически большое,  $A \gg a^2$ , ничего не изменится.

# Лекция V

## ФОНОНЫ

### Микроскопическая модель

Из решения классической задачке 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:

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

( $\alpha, \beta = (x, y, z)$  — 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:

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

Полученный объект является тензором второго ранга (матрицей) по индексам  $\alpha, \beta$ , и обладает следующими общими свойствами:

- 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:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{\hat{p}_{\alpha}^2(\mathbf{r})}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} U_{\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{u}_{\beta}(\mathbf{r}'), \quad [\hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}), \hat{p}_{\beta}(\mathbf{r}')] = i\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (\text{V.3})$$

### Нормальные координаты

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

$$\hat{p}_{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (\text{V.4})$$

$$\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{p}_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} \hat{u}_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (\text{V.5})$$

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

$$[\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}, \hat{p}_{\alpha,-\mathbf{q}}] = i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \quad (\text{V.6})$$

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:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{1}{2m} \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} \hat{p}_{\alpha,-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} \hat{u}_{\beta,-\mathbf{k}} \right), \quad [\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}, \hat{p}_{\beta,-\mathbf{k}'}] = i\delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (\text{V.7})$$

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:

$$\begin{cases} \frac{d\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}}] & = -U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\beta,\mathbf{k}} \\ \frac{d\hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}}{dt} = i[\hat{H}, \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}}] & = \frac{1}{m} p_{\alpha,\mathbf{k}} \end{cases} \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} + \frac{1}{m} U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) u_{\beta,\mathbf{k}} = 0 \quad (\text{V.8})$$

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  $m\omega_i^2(\mathbf{k})$ :

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) e_\beta^{(i)}(\mathbf{k}) = m\omega_i^2(\mathbf{k}) e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \quad (\text{V.9})$$

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.
- $U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  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,  $U_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) = U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ . В частности, 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  $\pm 1$  (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  $e_\alpha^{\parallel}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}}{k}$ , что удовлетворяет этому свойству).

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

$$\hat{p}_{\alpha,\mathbf{k}} = \sum_i e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \hat{p}_{\mathbf{k},i}, \quad \hat{u}_{\alpha,\mathbf{k}} = \sum_i e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \quad (\text{V.10})$$

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

$$\hat{p}_{-\mathbf{k},i}^\dagger = \sum_\alpha e_\alpha^{(i)}(-\mathbf{k}) p_{\alpha,-\mathbf{k}}^\dagger = -\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \quad \hat{u}_{-\mathbf{k},i}^\dagger = -\hat{u}_{\mathbf{k},i} \quad (\text{V.11})$$

$$[\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{-\mathbf{k}',j}] = e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) e_\beta^{(j)}(-\mathbf{k}') [u_{\alpha,\mathbf{k}}, \hat{p}_{\beta,-\mathbf{k}'}] = -i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{ij} \quad (\text{V.12})$$

$$\hat{H} = - \sum_{\mathbf{k},i} \left( \frac{1}{2m} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \hat{p}_{-\mathbf{k},i} + \frac{1}{2} m\omega_i^2(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \hat{u}_{-\mathbf{k},i} \right) \quad (\text{V.13})$$

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

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \hat{p}_{\mathbf{k},i} & = -m\omega_i^2(\mathbf{k}) \hat{u}_{\mathbf{k},i} \\ \frac{d}{dt} \hat{u}_{\mathbf{k},i} & = \frac{1}{m} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \end{cases} \quad (\text{V.14})$$

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:

$$\begin{cases} \hat{a}_{\mathbf{k},i} = \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} \left( \hat{u}_{\mathbf{k},i} + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} \hat{p}_{\mathbf{k},i} \right) \\ \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} \left( -\hat{u}_{-\mathbf{k},i} + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} \hat{p}_{-\mathbf{k},i} \right) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \hat{u}_{\mathbf{k},i} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega_i(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} - \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) \\ \hat{p}_{\mathbf{k},i} = \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} (-i)(\hat{a}_{\mathbf{k},i} + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger) \end{cases} \quad (\text{V.15})$$

Непосредственной проверкой убеждаемся, что коммутационные соотношения канонические:

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{q},j}^\dagger] = \frac{m\sqrt{\omega_i(\mathbf{k})\omega_j(\mathbf{q})}}{2} \left( \frac{i}{m\omega_j(\mathbf{q})} [\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{-\mathbf{q},j}] - \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} [\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \hat{u}_{-\mathbf{q},j}] \right) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}\delta_{ij} \quad (\text{V.16})$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k},i}, \hat{a}_{\mathbf{q},j}] = \frac{m\sqrt{\omega_i(\mathbf{k})\omega_j(\mathbf{q})}}{2} \left( \frac{i}{m\omega_j(\mathbf{k})} [\hat{u}_{\mathbf{k},i}, \hat{p}_{\mathbf{q},j}] + \frac{i}{m\omega_i(\mathbf{k})} [\hat{p}_{\mathbf{k},i}, \hat{u}_{\mathbf{q},j}] \right) = 0 \quad (\text{V.17})$$

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

$$\begin{aligned} \hat{H} &= - \sum_{\mathbf{k},i} \left( -\frac{1}{2m} \cdot \frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger)(\hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger) + \frac{1}{2} m\omega_i^2(\mathbf{k}) \cdot \frac{1}{2m\omega_i(\mathbf{k})} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} - \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger)(\hat{a}_{-\mathbf{k},i} - \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger) \right) = \\ &= \sum_{\mathbf{k},i} \frac{1}{4} \omega_i(\mathbf{k}) \left( \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i} \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k},i} + \hat{a}_{\mathbf{k},i} \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger \right) = \sum_{\mathbf{k},i} \omega_i(\mathbf{k}) \left( \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},i} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (\text{V.18})$$

Приведём для справки окончательный ответ в виде разложения операторов смещения через вектора поляризации и операторы, диагонализующие гамильтониан:

$$\begin{cases} \hat{u}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},i} \frac{e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k})}{\sqrt{2m\omega_i(\mathbf{k})}} (\hat{a}_{\mathbf{k},i} e^{-i\omega_i(\mathbf{k})t+i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger e^{i\omega_i(\mathbf{k})t-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \\ \hat{p}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},i} e_\alpha^{(i)}(\mathbf{k}) \sqrt{\frac{m\omega_i(\mathbf{k})}{2}} (-i) (\hat{a}_{\mathbf{k},i} e^{-i\omega_i(\mathbf{k})t+i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},i}^\dagger e^{i\omega_i(\mathbf{k})t-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \end{cases} \quad (\text{V.19})$$

### 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 чисел  $\mu$  и  $\lambda$ :

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = V_0((\lambda + \mu)k_\alpha k_\beta + \mu k^2 \delta_{\alpha\beta}), \quad ka \ll 1 \quad (\text{V.20})$$

(других тензоров составить нельзя; величина  $V_0$  определяет объем элементарной ячейки). Можно показать, что определённые таким образом коэффициенты  $\lambda$  и  $\mu$  являются термодинамическими величинами и называются *модулями упругости*<sup>16</sup>. 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 «паралельна»  $\mathbf{k}$ :

$$e_\alpha^{(l)}(\mathbf{k}) \equiv \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad \omega_l^2(\mathbf{k}) = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} k^2 \equiv c_l^2 k^2, \quad c_l^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} \quad (\text{V.21})$$

(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:

$$U_{\alpha\beta}(\mathbf{k})e_\beta^{(t,1/2)} = V_0\mu k^2 e_\alpha^{(t,1/2)} \Rightarrow \omega_t^2(\mathbf{k}) = \frac{\mu}{\rho} k^2 \equiv c_t^2 k^2, \quad c_t^2 = \frac{\mu}{\rho} \quad (\text{V.22})$$

<sup>16</sup>Вообще 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  $\sigma$ . Все эти модули упругости выражаются через любые два; в качестве пары основных мы выберем так называемый второй коэффициент Ламэ  $\lambda$  и модуль сдвига  $\mu$ .



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

В реальности 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.

## Макроскопическая модель

Вместо разработанной тут микроскопической теории, можно было бы стартовать сразу с полевого описания, известного из теории упругости. 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:

$$T = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \rho \dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r}) \quad (\text{V.23})$$

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  $\lambda$  и модуля сдвига  $\mu$  она имеет наиболее простой вид:

$$\Pi = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (\lambda u_{\gamma\gamma}^2 + 2\mu u_{\alpha\beta}^2) \equiv \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [(\lambda + \mu)(\partial_\gamma u_\gamma)^2 + \mu(\partial_\alpha u_\beta)^2] \quad (\text{V.24})$$

(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; полученная теория поля будет эквивалентна В качестве промежуточного действия, выпишем уравнения движения для  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  (которые будут такими же и в операторном формализме):

$$\rho \ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) - \mu \text{graddiv} \mathbf{u} - \frac{1}{2} \lambda \Delta \mathbf{u} = 0 \quad (\text{V.25})$$

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 предъяснить:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k},l} = \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}}) \mathbf{k}}{k^2} \Rightarrow \mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k},l} = 0, \quad \mathbf{u}_{\mathbf{k},t} \equiv \mathbf{u}_{\mathbf{k}} - \mathbf{u}_{\mathbf{k},l} \Rightarrow \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k},t} = 0 \quad (\text{V.26})$$

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

$$\begin{cases} \ddot{\mathbf{u}}_l(\mathbf{r}) - c_l^2 \Delta \mathbf{u}_l = 0 \\ \ddot{\mathbf{u}}_t(\mathbf{r}) - c_t^2 \Delta \mathbf{u}_t = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} c_l^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} \\ c_t^2 = \frac{\mu}{\rho} \end{cases} \quad (\text{V.27})$$

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.

## Деформационный потенциал и электрон-фононное взаимодействие

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 как-то 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  $\psi(\mathbf{r})$ , 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  $U_0(\mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{r}$ ). 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:

$$\hat{H}_{e-ph} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \delta V(\mathbf{r}), \quad \delta V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}'} u_\alpha(\mathbf{r}') \partial_\alpha U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \int \frac{d\mathbf{r}'}{V_0} u_\alpha(\mathbf{r}') \partial_\alpha U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d\mathbf{r}'}{V_0} \partial_\alpha u_\alpha(\mathbf{r}') U_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{V.28})$$

(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  $U_0(\mathbf{k}) = \frac{4\pi Z e^2}{k^2}$  — оно 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  $-e\delta n(\mathbf{r})$ , 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,  $\theta$  — функция Хевисайда), заменяется на  $n_F(E + U(\mathbf{r}))$ . Это в свою очередь приводит к локальной изменению концентрации электронов:

$$\delta n(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} [n_F(E_{\mathbf{p}} + U(\mathbf{r})) - n_F(E_{\mathbf{p}})] \approx U(\mathbf{r}) \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\partial n_F}{\partial E} \approx -U(\mathbf{r}) \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \delta(E_F - E_{\mathbf{p}}) \equiv -\nu U(\mathbf{r}) \quad (\text{V.29})$$

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:

$$\nabla^2 \phi = -4\pi e \delta n(\mathbf{r}) \Rightarrow \phi_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi e}{k^2} \delta n_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi \nu e}{k^2} U_{\mathbf{k}} \quad (\text{V.30})$$

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:

$$U_{\mathbf{k}} = U_{0, \mathbf{k}} - \frac{4\pi \nu e^2}{k^2} U_{\mathbf{k}} \Rightarrow U_{\mathbf{k}} = \frac{k^2 U_{0, \mathbf{k}}}{k^2 + 4\pi \nu e^2} = \frac{4\pi Z e^2}{k^2 + 4\pi \nu e^2} \quad (\text{V.31})$$

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:

$$\hat{H}_{e-ph} = \frac{Z}{\nu V_0} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \text{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) \quad (\text{V.32})$$

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  $\omega_D/E_F$ ; 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  $\text{div}\mathbf{u}(\mathbf{r})$  совпадает с локальным относительным изменением 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  $\delta n = n \frac{\delta V}{V} = n \text{div}\mathbf{u}$ . Это изменение, в свою очередь, приводит к локальному повышению химического потенциала — энергии Ферми — на величину  $\delta\mu = \frac{\partial E_F}{\partial n} \delta n \equiv \frac{n}{\nu} \text{div}\mathbf{u}$  ( $\nu$  — 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:

$$\hat{H}_{e-ph} = \frac{gn}{\nu} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \text{div}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) \quad (\text{V.33})$$

(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)

У [ЛШ], разложение поля  $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$  имеет буквально такой же вид, как и в формуле (V.19) (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

$$\hat{\varphi}(\mathbf{r}) = c\sqrt{\rho} \text{div}\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\omega(\mathbf{k})}{2}} \cdot i(\hat{a}_{\mathbf{k},||} e^{-i\omega(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},||}^\dagger e^{i\omega(\mathbf{k})t - i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad \omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}| \quad (\text{V.34})$$

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  $\zeta$  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 следующих соотношений  $\nu = \frac{mp_F}{2\pi^2}$ ,  $n = \frac{p_F^3}{3\pi^2}$ ; тем самым:

$$\zeta = \frac{g^2}{3\pi^2} \cdot \frac{mp_F^3}{\rho} \cdot \frac{v_F^2}{c^2} \sim 1 \cdot \frac{m}{M} \cdot \frac{M}{m} \sim 1 \quad (\text{V.35})$$

# Задачи

## Упражнение

Покажите, что теорию, описывающую только продольные фононы, можно описать в терминах скалярного поля  $\varphi(\mathbf{r})$ , которое определяется через Фурье как  $\varphi_{\mathbf{k}} = (\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}})/|\mathbf{k}|$ . Покажите, что теория поля, описывающая поле  $\varphi(\mathbf{r})$ , с точностью до обозначений совпадает с безмассовой теорией Клейна-Гордона, со скоростью света заменённой на скорость продольного звука  $c \equiv c_l$ :

$$\hat{H}_{ph} = \frac{\rho}{2} \int d\mathbf{r} [\hat{\pi}^2 + c^2(\nabla\hat{\varphi})^2] \quad (\text{V.36})$$

## Задача 1. Время жизни фонона

Рассмотрите модель трёхмерного металла, описывающую электроны, взаимодействующие с фононами:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \left[ \hat{\psi}^\dagger \left( -\frac{1}{2m} \Delta \right) \hat{\psi} + \frac{\rho}{2} (\hat{\pi}^2 + c^2(\nabla\hat{\varphi})^2) + \frac{gn}{\nu} \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} (|\nabla\hat{\varphi}|) \right] = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} \hat{c}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{H}_{e-ph} \quad (\text{V.37})$$

$$\epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m}, \quad \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|, \quad [\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger] = \{\hat{c}_{\mathbf{p}}, \hat{c}_{\mathbf{q}}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \quad (\text{V.38})$$

(оператор  $|\nabla|$  действует в Фурье-пространстве как домножение на  $i|\mathbf{k}|$ ). Концентрация электронов равна  $n$ . Вычислите время жизни фонона с частотой  $\omega$  в такой системе.

1. Волновая функция, описывающая систему, представляет собой произведение волновой электронной системы  $|\Omega\rangle$  (заполненная Ферми-сфера) и фононного вакуума  $|0\rangle$ .
2. Предлагается использовать золотое правило Ферми, используя  $\hat{H}_{e-ph}$  как возмущение. Начальное состояние содержит фонон импульсом  $\mathbf{k}$ :  $|i\rangle = \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle$ . Конечное состояние содержит электрон-дырочную пару  $|f\rangle = \hat{c}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}_2} |0\rangle$  (при этом импульс электрона равен  $\mathbf{p}_1$  и  $|\mathbf{p}_1| > p_F$ ; а импульс дырки равен  $-\mathbf{p}_2$  и  $|\mathbf{p}_2| < p_F$ ). Покажите, что только такие матричные элементы отличны от нуля  $H_{if}^{(e-ph)} = \langle i | \hat{H}_{e-ph} | f \rangle \neq 0$ . Вычислите матричный элемент; покажите, что он отличен от нуля при выполнении закона сохранения импульса  $\mathbf{k} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$ .
3. Вычислите энергию начального состояния  $\epsilon_i$  и конечного состояния  $\epsilon_f$ .
4. Время жизни определяется скоростью переходов  $w_{i \rightarrow f} = 2\pi \left| H_{if}^{(e-ph)} \right|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_f)$ , просуммированному по всем конечным состояниям  $\tau_i^{-1} = \sum_f w_{i \rightarrow f}$ . Покажите, что у этого выражения имеется конечный предел бесконечного объема системы  $V \rightarrow \infty$  (с заменой сумм по импульсам на интегралы).
5. Чтобы разобраться с кинематикой рассеяния, удобно параметризовать конечные импульсы согласно  $\mathbf{p}_{1,2} = \mathbf{p} \pm \frac{\mathbf{k}}{2}$ , что автоматически удовлетворяет закону сохранения импульса. Энергию и импульс фонона нужно считать малыми, так что  $\omega \ll E_F$  и  $k \ll p_F$ .
6. Выразите ответ через безразмерный параметр  $\zeta = \frac{g^2 n^2}{\nu \rho c^2}$ . Покажите, что он действительно является безразмерным, а также оцените его.

**Литература** [ЛШ, глава 6 «электроны и фононы», задача 31]

## Лекция VI

# Функции Грина

### 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:

$$\hat{\phi}^{(-)}(x) | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{\phi}^{(+)}(x) \equiv 0 \quad (\text{VI.1})$$

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»<sup>17</sup>, 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:

$$\begin{aligned} D(x-y) &\equiv \langle 0 | \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) | 0 \rangle = \langle 0 | (\hat{\phi}^{(+)}(x) + \hat{\phi}^{(-)}(x)) (\hat{\phi}^{(+)}(y) + \hat{\phi}^{(-)}(y)) | 0 \rangle = \langle \hat{\phi}^{(-)}(x) \hat{\phi}^{(+)}(y) \rangle = \\ &= \langle 0 | [\hat{\phi}^{(-)}(x), \hat{\phi}^{(+)}(y)] + \hat{\phi}^{(+)}(y) \hat{\phi}^{(-)}(x) | 0 \rangle = [\hat{\phi}^{(-)}(x), \hat{\phi}^{(+)}(y)] \quad (\text{VI.2}) \end{aligned}$$

Последнее считается тривиально, используя разложение полевых операторов по лестничным:

$$\hat{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} e^{-ipx} + \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} e^{ipx}) \quad (\text{VI.3})$$

$$D(x-y) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} e^{-ip(x-y)} = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3 2E_{\mathbf{p}}} e^{-ip(x-y)} \quad (\text{VI.4})$$

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  $s^2 = (x-y)^2 = (x^0 - y^0)^2 - (\mathbf{x} - \mathbf{y})^2$ .

### 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:

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] = \langle 0 | \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) - \hat{\phi}(y) \hat{\phi}(x) | 0 \rangle = D(x-y) - D(y-x) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3 2E_{\mathbf{p}}} (e^{-ip(x-y)} - e^{ip(x-y)}) \quad (\text{VI.5})$$

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

<sup>17</sup>Говорят — «нормально упорядочить» выражение. Само выражение, в котором все операторы уничтожения стоят справа, а рождения — слева, называют *нормально упорядоченным*

скалярного произведения, и в экспоненте будет стоять  $p(x-y) = -\mathbf{pr}^{18}$ . 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 временно-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:

$$D_R(x-y) \equiv \theta(x^0 - y^0) \langle [\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] \rangle \quad (\text{VI.6})$$

Для выяснения её смысла, вычислим сперва её преобразование Фурье:

$$D_R(\omega, \mathbf{p}) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3 2E_{\mathbf{q}}} (e^{-iE_{\mathbf{q}}t + i\mathbf{q}\mathbf{r}} - e^{iE_{\mathbf{q}}t - i\mathbf{q}\mathbf{r}}) \quad (\text{VI.7})$$

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:

$$\int_0^\infty e^{i\omega t} dt \equiv \lim_{\text{def } \epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{i\omega t - \epsilon t} dt = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\omega + i\epsilon} \equiv \frac{i}{\omega + i0} \quad (\text{VI.8})$$

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:

$$D_R(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \left( \frac{i}{\omega - E_{\mathbf{p}} + i0} - \frac{i}{\omega + E_{\mathbf{p}} + i0} \right) = \frac{i}{(\omega + i0)^2 - E_{\mathbf{p}}^2} = \frac{i}{p^2 - m^2}, \quad (\text{VI.9})$$

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

$$(-\partial^2 - m^2)D_R(x) = i\delta^{(4)}(x), \quad (\text{VI.10})$$

то есть с точностью до множителя  $i^{19}$  она совпадает с *запаздывающим пропагатором классического* уравнения Клейна-Гордона! В действительности же, это самое общее свойство — такого рода выражения работают в самых разных теориях поля.

### 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:

$$\hat{T}\{\hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2)\} = \begin{cases} \hat{A}(t_1)\hat{B}(t_2), & t_1 > t_2 \\ \pm\hat{B}(t_2)\hat{A}(t_1), & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (\text{VI.11})$$

(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*):

$$D_F(x-y) = \langle \hat{T}\{\hat{\phi}(x)\hat{\phi}(y)\} \rangle \quad (\text{VI.12})$$

<sup>18</sup>На самом деле, конечно, даже к виду  $-p_z|\mathbf{r}|$

<sup>19</sup>В cond-mat запаздывающую функцию Грина часто вводят с дополнительным множителем  $-i$ , как раз чтобы в уравнении никаких множителей не было

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:

$$D_F(\omega, \mathbf{p}) = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \left( \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{-iE_{\mathbf{p}}t} + \int_{-\infty}^0 dt e^{i\omega t} e^{iE_{\mathbf{p}}t} \right) = \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} \left( \frac{i}{\omega - E_{\mathbf{p}} + i0} - \frac{i}{\omega + E_{\mathbf{p}} - i0} \right) = \boxed{\frac{i}{\omega^2 - E_{\mathbf{p}}^2 + i0} = \frac{i}{p^2 - m^2 + i0}} \quad (\text{VI.13})$$

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  $\omega$  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:

$$\boxed{(-\partial^2 - m^2)D_F(x) = i\delta^{(4)}(x)} \quad (\text{VI.14})$$

## 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 четырёхточечной корреляционной функции применения этого метода непосредственно связано с достаточно большой головной болью и большим количеством членов, которые нужно рассматривать (не говоря уж о ещё большем количестве полей). К счастью, такую процедуру можно провести в самом общем виде — 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. Продемонстрируем это на примере четырёхточечной корреляционной функции:

$$\langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_2)\hat{\phi}(x_3)\hat{\phi}(x_4) \rangle = \langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_2) \rangle \langle \hat{\phi}(x_3)\hat{\phi}(x_4) \rangle + \langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_3) \rangle \langle \hat{\phi}(x_2)\hat{\phi}(x_4) \rangle + \langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_4) \rangle \langle \hat{\phi}(x_2)\hat{\phi}(x_3) \rangle \quad (\text{VI.15})$$

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.
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

В таком виде формулируется теорема Вика для бозонных операторов. Для фермионов она 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*; эквивалентно,  $P$  — 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:

$$\langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_2)\hat{\phi}(x_3)\hat{\phi}(x_4) \rangle_{Fermi} = \langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_2) \rangle \langle \hat{\phi}(x_3)\hat{\phi}(x_4) \rangle - \langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_3) \rangle \langle \hat{\phi}(x_2)\hat{\phi}(x_4) \rangle + \langle \hat{\phi}(x_1)\hat{\phi}(x_4) \rangle \langle \hat{\phi}(x_2)\hat{\phi}(x_3) \rangle \quad (VI.16)$$

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

## Литература

[ПШ, Глава 2.4 «Поле Клейна-Гордона в пространстве-времени» и глава 4.3 «Теорема Вика»]



# Задачи

## Упражнения

1. (**как нельзя делать**) Пусть  $|n\rangle$  —  $n$ -тое возбужённое состояние квантового осциллятора. Вычислите  $\langle n | \hat{a} \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger | n \rangle$ . Сравните с результатом, который получился бы при (ошибочном) применении теоремы Вика и вычисления попарных свёрток.
2. («**Golden rule**») Теперь рассмотрите вещественную теорию Клейна-Гордона. Используя теорему Вика, вычислите следующий матричный элемент

$$V_{12,34} = \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 | \left( \frac{\lambda}{4!} \int \hat{\phi}^4(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} \right) | \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4 \rangle \quad (\text{VI.17})$$

(определение  $|\mathbf{p}\rangle$  вы найдёте в задачах ко второй лекции). Все импульсы можно считать попарно различными.

3. Используя *только* уравнения движения для полевых операторов, покажите явно, что запаздывающий  $D_R(x-y) = \theta(x^0 - y^0) \langle [\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(y)] \rangle$  и Фейнмановский  $D_F(x-y) = \langle \hat{T} \{ \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) \} \rangle$  пропагаторы действительно являются функциями Грина уравнения Клейна-Гордона (то есть — удовлетворяют уравнению Клейна-Гордона с правой частью  $i\delta^{(4)}(x-y)$ ).
4. Сделайте то же самое для комплексной теории Клейна-Гордона. Покажите, что при этом определение нужно слегка модифицировать (иначе получится ноль):

$$D_R(x-y) = \theta(x^0 - y^0) \langle [\hat{\phi}(x), \hat{\phi}^\dagger(y)] \rangle, \quad D_F(x-y) = \langle \hat{T} \{ \hat{\phi}(x) \hat{\phi}^\dagger(y) \} \rangle \quad (\text{VI.18})$$

(зануление на самом деле связано с наличием  $U(1)$ -симметрии в задаче —  $\phi \mapsto \phi e^{i\alpha}$ ).

5. Выразите коррелятор  $D(x-y) = \langle \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) \rangle$  для пространственно-подобной разности  $x-y$  (так что  $(x-y)^2 = -r^2$ ) через функцию Макдональда  $K_n(z)$ . Определите асимптотику при  $r \gg m^{-1}$  и  $r \ll m^{-1}$ . Последняя не должна содержать  $m$ , и, очевидно, совпадает с точным пропагатором в безмассовой теории  $m=0$ .

## Задача 1. Простой гармонический осциллятор

Рассмотрите « $0+1$ -мерную квантовую теорию поля» — квантовую механику простого гармонического осциллятора, который задаётся следующим действием:

$$S[\phi(t)] = \int dt \left( \frac{1}{2} \dot{\phi}^2(t) - \frac{1}{2} \omega_0^2 \phi^2(t) \right) \quad (\text{VI.19})$$

1. Перейдите к квантомеханическому описанию, введя операторы координаты и импульса с коммутационным соотношением  $[\hat{\phi}, \hat{\pi}] = i$ . Постройте операторы рождения и уничтожения  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$ , диагонализуйте гамильтониан.
2. Решите уравнения Гейзенберга для лестничных операторов. Используя их, вычислите Фейнмановский и запаздывающий пропагаторы:

$$D_F(t_1 - t_2) = \langle \hat{T} \{ \hat{\phi}(t_1) \hat{\phi}(t_2) \} \rangle, \quad D_R(t_1 - t_2) = \theta(t_1 - t_2) \langle [\hat{\phi}(t_1), \hat{\phi}(t_2)] \rangle. \quad (\text{VI.20})$$

Покажите, что они совпадают с функциями Грина классического уравнения ПГО. Вычислите их Фурье-образы  $D_F(\omega)$  и  $D_R(\omega)$ .

3. Используя *только* операторные уравнения для движения полей  $\hat{\phi}(t)$  и  $\hat{\pi}(t)$ , покажите явным вычислением, что построенные тут объекты являются функциями Грина уравнения ПГО.

## Задача 2. Связь разных функций Грина

Пусть  $\hat{H}_0$  — произвольный одночастичный гамильтониан (например,  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{x})$ ). Рассмотрим соответствующую многочастичную задачу с полевым гамильтонианом:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{H}_0 \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (\text{VI.21})$$

1. Пусть известен полный набор решений одночастичного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом  $\hat{H}_0$  — ортонормированные волновые функции  $\psi_n(\mathbf{x})$  и соответствующие им энергии  $E_n$ . Выразите через них полевые операторы, а также запаздывающую функцию Грина:

$$G_R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t_1 - t_2) = \begin{cases} -i\theta(t_1 - t_2) \langle [\hat{\psi}(\mathbf{x}_1, t_1), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2, t_2)] \rangle, & \text{bosons} \\ -i\theta(t_1 - t_2) \langle \{\hat{\psi}(\mathbf{x}_1, t_1), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2, t_2)\} \rangle, & \text{fermions} \end{cases} \quad (\text{VI.22})$$

2. С другой стороны, выразите через те же величины одночастичную функцию Грина — *резольвенту* — определяемую следующим образом:

$$G_R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, E) = \langle \mathbf{x}_1 | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0} | \mathbf{x}_2 \rangle \quad (\text{VI.23})$$

3. Наконец, вычислите *пропагатор*, описывающий распространение частицы из точки  $\mathbf{x}_2$  в точку  $\mathbf{x}_1$  за время  $t_1 - t_2$ :

$$G_R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t_1 - t_2) = -i\theta(t_1 - t_2) \langle \mathbf{x}_1 | \hat{U}(t_1 - t_2) | \mathbf{x}_2 \rangle, \quad \hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}_0 t) \quad (\text{VI.24})$$

4. Покажите, что выписанные выше три объекта, которые, вообще говоря, имеют разную структуру и возникают в разных задачах — эквивалентны друг другу.
5. Вычислите их в импульсном представлении для свободной частицы  $U(\mathbf{x}) \equiv 0$ .

### Задача 3. Другие функции Грина

Используя полученные знания, вычислите следующие Фейнмановские функции Грина (достаточно сделать это лишь в импульсном представлении!):

1. Функцию Грина свободного Ферми-газа:

$$G_F(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, t_1 - t_2) = -i \langle \Omega | \hat{T} \{ \hat{\psi}(\mathbf{x}_1, t_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2, t_2) \} | \Omega \rangle \quad (\text{VI.25})$$

(где  $|\Omega\rangle$  соответствует заполненной Ферми-сфере с импульсами  $p < p_F$ ). Покажите, что если  $|\Omega\rangle = |0\rangle$  (фермионов нет), то она совпадает с запаздывающим пропагатором; покажите также, что в общем случае знак инфинитезимальной мнимой части  $i0$  в знаменателе как раз определяется заполненностью состояния с соответствующим импульсом в основном состоянии.

2. Функцию Грина продольных фононов:

$$D_F(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, t_1 - t_2) = \langle \hat{T} \{ \text{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_1, t_1) \cdot \text{div} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_2, t_2) \} \rangle \equiv \langle \hat{T} \{ |\nabla| \hat{\phi}(\mathbf{x}_1, t_1) \cdot |\nabla| \hat{\phi}(\mathbf{x}_2, t_2) \} \rangle \quad (\text{VI.26})$$

## Лекция VII

# Фейнмановская диаграммная техника

### Теория возмущений

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:

$$S_{int} = -\frac{\lambda}{4!} \int d^4x \phi^4(x), \quad \hat{V}_{int} = \frac{\lambda}{4!} \int d^3\mathbf{x} \cdot \hat{\phi}^4(\mathbf{x}) \quad (\text{VII.1})$$

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  $|\Omega\rangle$ :

$$D_F(x-y) \equiv \langle \Omega | T \{ \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(y) \} | \Omega \rangle, \quad (\text{VII.2})$$

которая в свободной теории имела вид  $D_F(p) = i/(p^2 - m^2 + i0)$ . 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:

$$e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)} |0\rangle = \sum_n e^{-iE_n T} e^{-\epsilon E_n T} |n\rangle \langle 0|n\rangle \approx e^{-iE_\Omega T} e^{-\epsilon E_\Omega T} |\Omega\rangle \langle 0|\Omega\rangle \quad (\text{VII.3})$$

Таким образом, такая эволюция действует за счёт малой мнимой части эффективно как проектор на основное состояние — состояние с наименьшей энергией  $E_\Omega$ . Конечно, тут сразу имеется несколько важных допущений. Во-первых, основное состояние должно быть невырождено<sup>20</sup>. Во-вторых, оно должно перекрываться с вакуумом  $\langle 0|\Omega\rangle$ <sup>21</sup>. В-третьих — в идеале, оно должно быть отделено от возбуждённых состояний энергетической щелью<sup>22</sup>. Ну и наконец, важен порядок взятия пределов — сперва  $T \rightarrow +\infty$ , а затем  $\epsilon \rightarrow +0$ . Получаем:

$$|\Omega\rangle = \frac{e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)} |0\rangle}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)} \langle 0|\Omega\rangle}, \quad \langle \Omega| = \frac{\langle 0| e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)}}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)} \langle \Omega|0\rangle}, \quad (\text{VII.4})$$

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)

$$\langle \Omega | \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) | \Omega \rangle = \frac{\langle 0 | e^{-i\hat{H}T} \hat{O}_1(t_1) \dots \hat{O}_N(t_N) e^{-i\hat{H}T} | 0 \rangle}{e^{-2iE_\Omega T} |\langle \Omega | 0 \rangle|^2} \quad (\text{VII.5})$$

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

$$e^{-2iE_\Omega T} |\langle \Omega | 0 \rangle|^2 = \langle 0 | e^{-2i\hat{H}T} | 0 \rangle \quad (\text{VII.6})$$

<sup>20</sup>Обычно это так, но это может нарушаться в системах со спонтанно нарушенной симметрией, где основное состояние имеет значительное вырождение

<sup>21</sup>Это 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.

<sup>22</sup>В 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 ровно с существованием таких фотонов.

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

$$\langle \Omega | \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) | \Omega \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{U}(T, t_1) \hat{O}_1 \hat{U}(t_1, t_2) \dots \hat{U}(t_{N-1}, t_N) \hat{O}_N \hat{U}(t_N, -T) | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{U}(T, -T) | 0 \rangle} \quad (\text{VII.7})$$

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  $\gamma$ . 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  $\gamma$  должна быть меньше щели в спектре). В таком случае мы получим попросту следующее:

$$|\Omega\rangle = \hat{U}(0, -T) |0\rangle \quad (\text{VII.8})$$

Это приводит нас к следующей формуле:

$$\langle \Omega | \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) | \Omega \rangle = \langle 0 | \hat{U}(-T, t_1) \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) \hat{U}(0, -T) | 0 \rangle \quad (\text{VII.9})$$

(эволюция тем самым тут происходит по замкнутому временному контуру — читая справа налево, мы получаем  $-T \rightarrow t_N \rightarrow \dots \rightarrow t_1 \rightarrow -T$ )<sup>23</sup>. 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  $\hat{U}(T, -T) |0\rangle$  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):

$$\hat{U}(T, -T) |0\rangle \simeq e^{i\Phi} |0\rangle \quad (\text{VII.10})$$

Это позволяет нам записать цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) | \Omega \rangle &= \langle 0 | \hat{U}(-T, T) \hat{U}(T, t_1) \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) \hat{U}(0, -T) | 0 \rangle = \\ &= e^{-i\Phi} \langle 0 | \hat{U}(T, t_1) \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) \hat{U}(0, -T) | 0 \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{U}(T, t_1) \hat{O}_1 \hat{U}(t_1, t_2) \dots \hat{U}(t_{N-1}, t_N) \hat{O}_N \hat{U}(t_N, -T) | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{U}(T, -T) | 0 \rangle}, \end{aligned} \quad (\text{VII.11})$$

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:

$$\hat{S}(t_2, t_1) = \hat{T} \left\{ \exp \left( -i \int_{t_1}^{t_2} \hat{V}(\tau) d\tau \right) \right\} \quad (\text{VII.12})$$

(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:

$$\langle \Omega | \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) | \Omega \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{S}(T, t_1) \hat{O}_1(t_1) \hat{S}(t_1, t_2) \dots \hat{S}(t_{N-1}, t_N) \hat{O}_N(t_N) \hat{S}(t_N, -T) | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{S}(T, -T) | 0 \rangle} \quad (\text{VII.13})$$

<sup>23</sup>Это 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.

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:

$$\langle \Omega | \hat{\mathcal{T}} \{ \hat{O}_1(t_1) \hat{O}_2(t_2) \dots \hat{O}_N(t_N) \} | \Omega \rangle = \frac{\langle 0 | \hat{\mathcal{T}} \{ \hat{O}_1(t_1) \dots \hat{O}_N(t_N) \hat{S} \} | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle}, \quad \hat{S} \equiv \hat{S}(T, -T) \quad (\text{VII.14})$$

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

## Фейнмановские диаграммы для пропагатора теории $\phi^4$

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  $\phi^4$  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*:

$$\langle 0 | \phi(x) \phi(y) \hat{S} | 0 \rangle = \sum (\text{все диаграммы}) = \sum (\text{все связные диаграммы}) \times \exp \left( \sum (\text{вакуумные пузыри}) \right) \quad (\text{VII.15})$$

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

$$\langle 0 | \hat{S} | 0 \rangle = \exp \left( \sum (\text{вакуумные пузыри}) \right) \quad (\text{VII.16})$$

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):

$$\epsilon_\Omega = \frac{E_\Omega}{V_3} = -\frac{1}{V_4} \text{Im} \sum (\text{вакуумные пузыри}) \quad (\text{VII.17})$$

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

$$D_F(x - y) = \langle \Omega | \phi(x) \phi(y) | \Omega \rangle = \sum (\text{все связные диаграммы}) \quad (\text{VII.18})$$

## 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):

$$-i\Sigma(x-y) = \sum (\text{одночастично неприводимые диаграммы с ампутированными концами}) \quad (\text{VII.19})$$

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

$$\boxed{\hat{D}_F = \hat{D}_F^{(0)} + \hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F^{(0)} + \hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F^{(0)} + \dots \equiv \hat{D}_F^{(0)} + \hat{D}_F^{(0)}(-i\hat{\Sigma})\hat{D}_F}, \quad (\text{VII.20})$$

или, в координатной форме:

$$D_F(x-y) = D_F^{(0)}(x-y) + \int d^4z_1 d^4z_2 D_F^{(0)}(x-z_1)(-i\Sigma(z_1-z_2))D_F(z_2-y) \quad (\text{VII.21})$$

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  $\Sigma$ .

## 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  $\int \frac{d^4p_i}{(2\pi)^4}$ .
5. И опять диаграмму необходимо разделить на её симметричный фактор.

Используя преобразование Фурье, уравнение Дайсона тривиально решается:

$$D_F(p) = D_F^{(0)}(p) + D_F^{(0)}(p)(-i\Sigma(p))D_F(p) \Rightarrow D_F(p) = \frac{i}{i(D_F^{(0)}(p))^{-1} - \Sigma(p)} = \frac{i}{p^2 - m^2 - \Sigma(p)} \quad (\text{VII.22})$$

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 стрелки<sup>24</sup>) и фононные линии, а вершины взаимодействия содержат два «электронных» хвоста (соответствующих  $\psi^\dagger(x)\psi(x)$ ) и один фононный (соответствующий  $\text{div}\mathbf{u}(\mathbf{r})$ ).

## Литература

[ПШ, Глава 4.2 «Разложение корреляционных функций по теории возмущений» и глава 4.4 «Диаграммы Фейнмана»]

---

<sup>24</sup>Разные 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.

## Задачи

В следующих упражнениях рассматривается вещественная теория Клейна-Гордона с возмущением вида  $\phi^4$ .

### Упражнение 1. Теорема Вика и симметричные факторы

Рассмотрите Фейнмановский пропагатор:

$$D(x-y) = \langle \Omega | \hat{T} \{ \phi(x) \phi(y) \} | \Omega \rangle = \frac{\langle \phi(x) \phi(y) \hat{S} \rangle}{\langle \hat{S} \rangle}, \quad \hat{S} = \mathcal{T} \left\{ \exp \left( -i \frac{\lambda}{4!} \int d^4 z \phi^4(z) \right) \right\} \quad (\text{VII.23})$$

1. Разложите экспоненту вплоть до четвёртого порядка теории возмущений. Нарисуйте все диаграммы для первого и второго порядков, а также только связанные диаграммы в третьем порядке теории возмущений.
2. Вычислите полное количество свёрток, которые соответствуют каждой из диаграмм. Напишите аналитическое выражение для каждой диаграмм, с учётом их найденного симметричного фактора, через невозмущённые пропагаторы Фейнмана  $D_0(x-y)$ .
3. Повторите те же пункты для знаменателя.

**Указание. Числитель** В  $N$ -том порядке ТВ имеется  $4N+2$  полевых операторов и соответственно  $(4N+1)!!$  способов спаривания (для  $N = 1, 2, 3$  это даёт соответственно 15, 945 и 135135 спариваний).

- В первом порядке должно получиться 2 диаграммы ( $3 + 12 = 15$  спариваний)
- Во втором порядке — 7 диаграмм ( $9 + 24 + 72 + 72 + 192 + 288 + 288 = 945$  спариваний)
- В третьем порядке должно получиться 10 *связных* диаграмм, из которых две пары практически эквивалентны ( $6912 + 2 \cdot 6912 + 10368 + 10368 + 10368 + 2 \cdot 10368 + 20736 + 20736 = 114048$  спариваний; остальные приходятся а диаграммы с вакуумными пузырями)

**Указание. Знаменатель** В  $N$ -том порядке ТВ имеется  $4N$  полевых операторов и соответственно  $(4N-1)!!$  способов спаривания. В первых трёх порядках это соответственно 3, 105 и 10395 спариваний.

- В первом порядке должна получиться 1 диаграмма (3 спаривания)
- Во втором порядке должны получиться 3 диаграммы ( $9 + 24 + 72 = 105$  спариваний)
- В третьем порядке должно получиться 4 связных диаграммы ( $1728 + 1728 + 2592 + 3456 = 9504$  спариваний)

### Упражнение 2. Экспоненцирование связанных диаграмм

Рассмотрите знаменатель — среднее значение от  $\hat{S}$ -матрицы.

1. В прошлом выражении вы исследовали знаменатель вплоть до второго порядка теории возмущений. Покажите, что каждая диаграмма с  $b$  вакуумными пузырями пропорциональна  $V_4^b$ , где  $V_4 = V \cdot T$  — четырёхмерный объём системы ( $V$  — обычный, трёхмерный объём, а  $T$  — время наблюдения за ней).
2. Разложите теперь  $\ln \langle \hat{S} \rangle_0$  вплоть до второго порядка теории возмущений. Вычислите всевозможные свёртки и покажите непосредственным вычислением, что диаграммы с более чем одним вакуумным пузырьком полностью сокращаются, а полученный ответ пропорционален  $V_4$ .

### Упражнение 3. Собственная энергетическая часть

В этом упражнении мы научимся явное выражение для собственной энергетической части  $\Sigma(p)$ , с учётом всех необходимых множителей и симметричных факторов.

1. В первом упражнении вы выписывали аналитические формулы для первых двух порядков теории возмущений для Фейнмановского пропагатора (когда работали с числителем); кроме того, мы знаем, что диаграммы с вакуумными пузырями необходимо отбросить. Выпишите в координатном представлении аналитические формулы для двух диаграмм, которые изображены на рисунке.



2. Представьте аналитические выражения в виде следующей свёртки:

$$D_2(x, y) = \int d^4 z_1 d^4 z_2 D_0(x - z_1) (-i) \Sigma^{(2)}(z_1, z_2) D_0(z_2 - y) \quad (\text{VII.24})$$

Выпишите аналитическое выражение для  $\Sigma^{(2)}(z_1, z_2)$ . Покажите, что первая диаграмма, в частности, пропорциональна  $\delta(z_1 - z_2)$ , а также что вся собственная энергетическая часть зависит только от разности  $z_1 - z_2$ .

3. Выпишите выражения для преобразования Фурье  $\Sigma(p)$  через Фурье-образы невозмущённой функции Грина  $D_0(p)$ .
4. Вычислите вклад от первой диаграммы, используя размерную регуляризацию. Он даёт (ультрафиолетово расходящуюся) перенормировку массы частиц из-за взаимодействия.

### Задача 1. Квантовый ангармонический осциллятор

Квантовая механика может рассматриваться как частный случай квантовой теории поля в  $0+1$  измерениях. В данной задаче мы применим методы квантовой теории поля для ангармонического осциллятора — аналога теории «фи-в-четвёртой» в  $0+1$  измерениях. Рассмотрите квантовый гармонический осциллятор (см. задачу 1 предыдущего семинара) с возмущением  $V_{int} = \frac{\mu}{3!} \phi^3 + \frac{\lambda}{4!} \phi^4$ .

1. Выведите правила диаграммной техники для исследуемой теории.
2. Вычислите вакуумные пузыри, покажите, что они пропорциональны времени наблюдения за системой  $T$  и найдите поправки к энергии основного состояния  $\Delta E_{n=0}$  в первом исчезающем порядке по  $\mu$  и  $\lambda$  —  $O(\mu^2, \lambda)$ .
3. Найдите собственную энергетическую часть  $\Sigma(\omega)$  в том-же порядке теории возмущений.
4. Используя уравнение Дайсона, исследуйте, как сместится полюс функции Грина осциллятора  $\langle \Omega | \hat{T} \{ \hat{\phi}(t) \hat{\phi}(t') \} | \Omega \rangle$ . Функция Грина описывает *одночастичные возбуждения* системы, и поэтому полученное выражение в действительности определяет просто поправку к первому возбуждённому уровню осциллятора  $\Delta E_{n=1}$ .
5. Сравните все полученные ответы с известными из «обычной» теории возмущений.

**Указание** Все вычисления удобно производить во временном, а не частотном, представлении.

### Задача 2. «Обычная» теория возмущений

Рассмотрите одночастичную квантомеханическую задачу с каким-то гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{V}$ . Как обычно, полный набор собственных состояний невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$  известен:  $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n^{(0)} |n\rangle$ ; будем считать все собственные значения невырожденными. Резольвента, или функция Грина, для оператора  $\hat{H}$  определяется стандартным образом как  $\hat{G}(E) = (E - \hat{H} + i0)^{-1}$ ; невозмущенную функцию Грина мы будем называть  $\hat{G}^{(0)}(E) = (E - \hat{H}_0 + i0)^{-1}$ .

1. Постройте операторный ряд теории возмущений по  $\hat{V}$  для величины  $\hat{G}$ . Соответствующее диаграммное представление членов этого ряда имеет следующий вид:

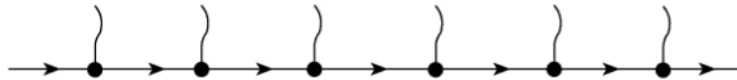


Рис. 4: Диаграммное представление произвольного элемента ряда теории возмущений для  $\hat{G}$ . Волнистой линии соответствуют операторы  $\hat{V}$ , а прямой — операторы  $\hat{G}_0$ .

2. В представлении собственных функций гамильтониана  $\hat{H}_0$ , невозмущённая функция Грина имеет диагональный вид:

$$\langle n | \hat{G}^{(0)} | m \rangle = G_n^{(0)} \delta_{nm}, \quad G_n^{(0)} = \frac{1}{E - E_n^{(0)} + i0} \quad (\text{VII.25})$$

Запишите ряд теории возмущений для величины  $G_n \equiv \langle n | \hat{G} | n \rangle$ , выразив его через различные  $G_n^{(0)}$ , а также матричные элементы  $V_{nm}$ . Покажите, что на графическом языке это соответствует следующим «правилам Фейнмана» — каждой

линии мы ставим в соответствие число  $n_i$ , по которому происходит суммирование; сама линия соответствует  $G_{n_i}^{(0)}$ ; а волнистая линия соответствует  $V_{n_i n_j}$ , где  $n_i$  соответствует левой линии, а  $n_j$  — правой.

3. Чтобы вывести «уравнение Дайсона», необходимо привести диаграммный ряд к «одночастично-неприводимому» ряду:

$$G_n = G_n^{(0)} + G_n^{(0)} \Sigma_n G_n^{(0)} + G_n^{(0)} \Sigma_n G_n^{(0)} \Sigma_n G_n^{(0)} + \dots, \quad G_n = \frac{1}{G_n^{(0)-1} - \Sigma_n} = \frac{1}{E - E_n^{(0)} - \Sigma_n(E) + i0} \quad (\text{VII.26})$$

Для этого при суммировании во всех промежуточных состояниях нужно явно выделить член с  $n_i = n$  (обозначим его на диаграммном языке линией с чёрточкой) и остальные, с  $n_i \neq n$  (которые мы будем обозначать просто прямой линией). В таком случае, на графическом языке необходимо суммировать по всем диаграммам, которые имеют вид, изображённый на рисунке — но при этом каждая линия может быть как с чёрточкой, так и нет. В таком случае в «собственную энергию»  $\Sigma_n$  должны попросту войти все диаграммы «без чёрточек», что соответствует следующему графическому представлению:

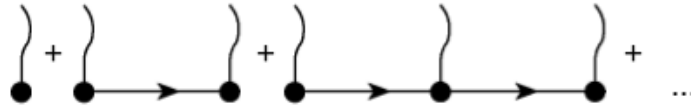


Рис. 5: Диаграммный ряд для  $\Sigma_n$ . Линии соответствуют  $\sum_{n_i \neq n} G_{n_i}^{(0)}$ , а волнистые линии соответствуют  $V_{n_i n_j}$

4. Напишите явно выражение для  $\Sigma_n$  вплоть до второго порядка теории возмущений, и выпишите соответствующее выражение для пропагатора  $G_n$ .
5. По построению, полюса функции Грина  $\hat{G}$  соответствуют собственным числам полного гамильтониана  $\hat{H}$  — а значит, точные уровни энергии  $E_n$  определяются из уравнения

$$G_n^{-1}(E_n) = 0 \Rightarrow E_n = E_n^{(0)} + \Sigma_n(E_n) \quad (\text{VII.27})$$

Это трансцендентное уравнение уже можно достаточно просто решить с учётом малости матричных элементов  $V$  с нужной точностью (которая должна соответствовать той же точности, с которой вы вычислили  $\Sigma_n(E)$ ). Решите его и покажите, что его решение воспроизводит известные формулы для первых двух поправок по теории возмущений к собственным значениям.

## Лекция VIII

# Интеграл по траекториям в квантовой теории поля

### 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:

$$G_R(x_1, x_2, t_1, t_2) \equiv \langle x_1 | \hat{U}(t_1, t_2) | x_2 \rangle \equiv \int_{x(t_2)=x_2}^{x(t_1)=x_1} \mathcal{D}[x(t)] \exp(iS[x(t)]), \quad t_1 > t_2 \quad (\text{VIII.1})$$

На этом семинаре мы свяжем одно с другим и научимся считать  $\mathcal{T}$ -упорядоченные корреляционные функции в квантовой теории поля с помощью функционального интеграла следующего вида:

$$G(t_1 > \dots > t_N) = \langle \Omega | \hat{x}(t_1) \dots \hat{x}(t_N) | \Omega \rangle \quad (\text{VIII.2})$$

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  $T(1 - i\epsilon)$ :

$$|\Omega\rangle = \frac{e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)} |x_b\rangle}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)} \langle x_b | \Omega \rangle}, \quad \langle \Omega | = \frac{\langle x_a | e^{-i\hat{H}T(1-i\epsilon)}}{e^{-iE_\Omega T(1-i\epsilon)} \langle \Omega | x_a \rangle} \quad (\text{VIII.3})$$

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:

$$G(t_1, \dots, t_N) = \frac{\langle x_a | \hat{U}(T, t_1) \hat{x} \hat{U}(t_1, t_2) \dots \hat{U}(t_{N-1}, t_N) \hat{x} \hat{U}(t_N, -T) | x_b \rangle}{\langle x_a | \hat{U}(T, -T) | x_b \rangle} \quad (\text{VIII.4})$$

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:

$$\langle x_a | \hat{U}(T, t_1) \hat{x} \hat{U}(t_1, t_2) \dots \hat{U}(t_{N-1}, t_N) \hat{x} \hat{U}(t_N, -T) | x_b \rangle = \int \prod_{n=1}^N dx_n \cdot x_1 \dots x_n \cdot \prod_{n=0}^N \int_{x_n(t_{n+1})=x_{n+1}}^{x_n(t_n)=x_n} \mathcal{D}[x_n(t)] e^{iS_n[x_n(t)]} \quad (\text{VIII.5})$$

(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  $T > t > -T$ :

$$x(t) = \begin{cases} x_0(t), & T > t > t_1 \\ \vdots \\ x_n(t), & t_N > t > -T \end{cases} \quad (\text{VIII.6})$$

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!):

$$\langle \Omega | \hat{T} \{ \hat{x}(t_1) \dots \hat{x}(t_N) \} | \Omega \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[x(t)] \cdot x(t_1) \dots x(t_N) \cdot \exp(iS[x(t)])}{\int \mathcal{D}[x(t)] \cdot \exp(iS[x(t)])} \quad (\text{VIII.7})$$

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  $P \propto e^{-|S|}$ .

## 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:

$$\langle \Omega | \hat{T} \{ \hat{\phi}(x_1) \dots \hat{\phi}(x_N) \} | \Omega \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\phi(x)] \cdot \phi(x_1) \dots \phi(x_N) \cdot \exp(iS[\phi(x)])}{\int \mathcal{D}[\phi(x)] \cdot \exp(iS[\phi(x)])} \quad (\text{VIII.8})$$

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

## 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:

$$Z = \int d\phi \exp\left(-\frac{1}{2}\phi_i L_{ij} \phi_j\right) = \int d\psi \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_i \Lambda_i \psi_i^2\right) = \prod_i \sqrt{\frac{2\pi}{\Lambda_i}} = \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\det \hat{L}}} \quad (\text{VIII.9})$$

Для вычисления средних значений  $\phi$  удобно ввести так называемый производящий функционал:

$$Z[J] = \int d\phi \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\phi_i L_{ij} \phi_j + J_i \phi_i\right) = Z[0] \cdot \langle e^{iJ_i \phi_i} \rangle \quad (\text{VIII.10})$$

и тогда, например, двойной коррелятор имеет вид:

$$\langle \phi_i \phi_j \rangle = \frac{1}{Z} \cdot \left. \frac{\partial^2 Z[J]}{\partial J_i \partial J_j} \right|_{J=0} \quad (\text{VIII.11})$$

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

$$Z[J] = \int d\psi \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_i \Lambda_i \psi_i^2 + J_j O_{ji} \psi_j\right) = \int d\psi \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_i \Lambda_i (\psi_i + J_j O_{ji} \Lambda_i^{-1})^2 + \frac{1}{2} J_j O_{ji} \Lambda_i^{-1} O_{ik}^T J_k\right) \quad (\text{VIII.12})$$

Беря интеграл по  $\psi$ , 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:

$$Z[J] = Z[0] \cdot \exp\left(\frac{1}{2} J_i L_{ij}^{-1} J_j\right) \quad (\text{VIII.13})$$

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  $\phi_i$ , 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:

$$Z = \int d\phi d\bar{\phi} \exp(-\bar{\phi}_i L_{ij} \phi_j) = \int d\bar{\psi} d\psi \exp\left(-\sum_i \Lambda_i |\psi_i|^2\right) = \prod_i \frac{\pi}{\Lambda_i} = \frac{\pi^N}{\det \hat{L}} \quad (\text{VIII.14})$$

Производящий функционал определяется чуть иначе:

$$Z[J, \bar{J}] = \int d\phi \exp(-\bar{\phi}_i L_{ij} \phi_j + \bar{J}_i \phi_i + J_i \bar{\phi}_i) = Z[0] \cdot \langle e^{\bar{J}_i \phi_i + J_i \bar{\phi}_i} \rangle \quad (\text{VIII.15})$$

из которого корреляторы извлекаются аналогичным образом:

$$\langle \phi_i \bar{\phi}_j \rangle = \frac{1}{Z} \cdot \left. \frac{\partial^2 Z[J, \bar{J}]}{\partial \bar{J}_i \partial J_j} \right|_{J=0} \quad (\text{VIII.16})$$

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

$$\int d\psi \exp\left(-\sum_i \Lambda_i |\psi_i|^2 + \bar{J}_j U_{ji} \psi_i + \bar{\psi}_i U_{ij}^\dagger J_j\right) = \int \int d\psi \exp\left(-\sum_i \Lambda_i (\bar{\psi}_i - \Lambda_i^{-1} \bar{J}_j U_{ji}) (\psi_i - \Lambda_i^{-1} U_{ij}^\dagger J_j) + \bar{J}_j U_{ji} \Lambda_i^{-1} U_{ik}^\dagger J_k\right) \quad (\text{VIII.17})$$

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

$$\boxed{Z[J, \bar{J}] = Z[0] \cdot \exp(\bar{J}_i L_{ij}^{-1} J_j)} \quad (\text{VIII.18})$$

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:

$$\langle \phi_i \phi_j \phi_k \phi_l \rangle = \frac{1}{Z} \cdot \frac{\partial^4 Z[J]}{\partial J_i \partial J_j \partial J_k \partial J_l} \Big|_{J=0} \quad (\text{VIII.19})$$

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,  $\phi_i$  и  $\phi_j$  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:

$$\langle \phi_i \phi_j \phi_k \phi_l \rangle = \langle \phi_i \phi_j \rangle \langle \phi_k \phi_l \rangle + \langle \phi_i \phi_k \rangle \langle \phi_j \phi_l \rangle + \langle \phi_i \phi_l \rangle \langle \phi_j \phi_k \rangle, \quad (\text{VIII.20})$$

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

### 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:

$$Z[J(x)] = \int \mathcal{D}[\phi(x)] \exp\left(iS[\phi(x)] + i \int J(x)\phi(x)dx\right) \equiv Z[0] \cdot \left\langle \exp\left(i \int J(x)\phi(x)dx\right) \right\rangle_0 \quad (\text{VIII.21})$$

и корреляторы считаются следующим образом:

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = \frac{1}{Z} \left( -i \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \left( -i \frac{\delta}{\delta J(y)} \right) Z[J(x)] \Big|_{J=0} \quad (\text{VIII.22})$$

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:

$$\boxed{Z[J(x)] = Z[0] \cdot \exp\left(-\frac{i}{2} \int dx dy J(x) G(x-y) J(y)\right)} \quad (\text{VIII.23})$$

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  $\omega = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ , 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  $\omega = -\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$  необходимо обходить снизу, в  $\omega = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$  — сверху.

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

## 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:

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(y) e^{iS_0 + iS_{int}} / \int \mathcal{D}\phi \cdot e^{iS_0}}{\int \mathcal{D}\phi e^{iS_0 + iS_{int}} / \int \mathcal{D}\phi e^{iS_0}} = \frac{\langle \phi(x)\phi(y) e^{iS_{int}} \rangle_0}{\langle e^{iS_{int}} \rangle_0} \quad (\text{VIII.24})$$

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

## Литература

[ПШ, Глава 9.2 «Функциональное квантование скалярных полей»]

## Задачи

### Упражнение 1. Задача для младенца

Рассмотрите «нульмерную теорию поля»  $\phi^4$ , производящий функционал для которой определяется следующим образом:

$$Z(j) = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi e^{-\frac{1}{2}m^2\phi^2 - \frac{\lambda}{4!}\phi^4 + ij\phi} \quad (\text{VIII.25})$$

1. Используя дифференцирование по параметру, вычислите  $\phi^{2n}$  для невозмущённой теории ( $\lambda = 0, j = 0$ ). Альтернативно, вычислите его, используя теорему Вика.
2. Изучите поправки произвольного  $n$ -того порядка теории возмущений по  $\lambda$  к «пропагатору»  $\langle\phi^2\rangle$ , и постройте диаграммную технику для её вычисления.
3. Найдите поправку произвольного порядка к  $Z(0)$ . Покажите, что ряд асимптотический, просуммируйте его оптимально и найдите его суперасимптотику.

**Литература** [Зи, глава 1.7 «Задача для младенца»]

### Упражнение 2. Пропагатор фотона

Используя интеграл по траекториям, вычислите пропагатор фотона  $D_{\mu\nu}(x-y) = \langle A_\mu(x)A_\nu(y) \rangle$  для электромагнетизма, описываемого следующим действием:

$$S[A_\mu] = -\frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}(x)F_{\mu\nu}(x), \quad F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) \quad (\text{VIII.26})$$

Соответствующий оператор имеет нулевую моду, что связано с калибровочной симметрией действия  $S[A_\mu + \nabla\alpha] \equiv S[A_\mu]$ , поэтому непосредственно обратить его невозможно. Для того, чтобы «обойти» эту проблему, можно ввести «фиксирующий калибровку» (gauge fix) и нарушающий калибровочную инвариантность член в действие:

$$S_{GF}[A_\mu, \xi] = -\frac{1}{2\xi} \int d^4x (\partial_\mu A_\mu)^2 \quad (\text{VIII.27})$$

(например, предел  $\xi \rightarrow 0$  соответствует калибровке Лоренца  $\partial_\mu A_\mu = 0$ ).

**Литература** Обсуждение такого способа фиксации калибровки можно найти на английской Википедии [https://en.wikipedia.org/wiki/Gauge\\_fixing#R.CE.BE.gauges](https://en.wikipedia.org/wiki/Gauge_fixing#R.CE.BE.gauges); обсуждение проблемы квантования электромагнитного поля также есть в [ПШ, стр. 93]



## Лекция IX

# Интеграл по траекториям в многочастичной квантовой механике

### 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  $\phi \in \mathbb{C}$ :

$$\hat{a}|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle, \quad \langle\phi|\hat{a}^\dagger = \langle\phi|\bar{\phi} \quad (\text{IX.1})$$

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

$$|\phi\rangle = e^{\phi\hat{a}^\dagger}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \quad (\text{IX.2})$$

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

$$\langle\theta|\phi\rangle = \exp(\bar{\theta}\phi) \quad (\text{IX.3})$$

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

$$\hat{\mathbb{1}} = \int \underbrace{\frac{d(\text{Re}\phi)d(\text{Im}\phi)}{\pi}}_{\equiv d\phi d\bar{\phi}} e^{-|\phi|^2} |\phi\rangle\langle\phi| \quad (\text{IX.4})$$

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:

$$\eta_i\eta_j = -\eta_j\eta_i \quad (\text{IX.5})$$

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»):

$$\{1, \eta_1, \dots, \eta_N, \eta_1\eta_2, \eta_1\eta_3, \dots, \eta_{N-1}\eta_N, \dots, \eta_1 \dots \eta_N\} \quad (\text{IX.6})$$

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

$$\forall c \in \mathbb{C} \mapsto f(c + \eta) = f(c) + f'(c) \cdot \eta \quad (\text{IX.7})$$

(все следующие члены зануляются).

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

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j = \delta_{ij} \quad (\text{IX.8})$$

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

$$\int d\eta_i \eta_j = \delta_{ij} \quad (\text{IX.9})$$

(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:

$$\int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) e^{-\sum_{ij} \bar{\eta}_i L_{ij} \eta_j} = \det L \quad (\text{IX.10})$$

Можно просто это проверить для диагональной матрицы:

$$\int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) \exp(-\sum_i \lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i) = \int \prod_i (d\bar{\eta}_i d\eta_i) \prod_i \exp(-\lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i) = \int \prod_i (d\eta_i d\bar{\eta}_i \cdot (1 - \lambda_i \bar{\eta}_i \eta_i)) = \prod_i \lambda_i \quad (\text{IX.11})$$

Тут мы в первом равенстве воспользовались тем, что пары грассмано­вых чисел ведут себя как обычные числа, а во втором — взятием экспоненты от грассмано­вого числа<sup>25</sup>.

## 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:

$$\hat{a} |\eta\rangle = \eta |\eta\rangle, \quad \langle \eta | \hat{a}^\dagger = \langle \eta | \bar{\eta} \quad (\text{IX.12})$$

Для такого состояния тоже работает выражение через экспоненту:

$$|\eta\rangle = e^{\eta \hat{a}^\dagger} |0\rangle = (1 + \eta \hat{a}^\dagger) |0\rangle = |0\rangle + \eta |1\rangle \quad (\text{IX.13})$$

<sup>25</sup>Сравните 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.

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:

$$\langle \eta_i | \eta_j \rangle = (\langle 0 | + \langle 1 | \bar{\eta}_i) (|0\rangle + \eta_j |1\rangle) = 1 + \bar{\eta}_i \eta_j = \exp(\bar{\eta}_i \eta_j) \quad (\text{IX.14})$$

Кроме того, также работает и разложение единицы:

$$\hat{\mathbb{1}} = \int d\bar{\eta} d\eta e^{-\bar{\eta}\eta} |\eta\rangle \langle \eta| = \int d\bar{\eta} d\eta (1 - \bar{\eta}\eta) (|0\rangle + \eta |1\rangle) (\langle 0| + \bar{\eta} \langle 1|) = |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| \quad (\text{IX.15})$$

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  $\pi$  в определении  $d\bar{\phi}d\phi$ ).

## 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:

$$G_R(\phi, \phi', T > 0) = \langle \phi | e^{-i\hat{H}T} | \phi' \rangle \quad (\text{IX.16})$$

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

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int \prod_{k=1}^{N-1} (d\bar{\phi}_k d\phi_k \exp(-\bar{\phi}_k \phi_k)) \langle \phi_N \equiv \phi | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_{N-1} \rangle \dots \langle \phi_2 | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_1 \rangle \langle \phi_1 | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_0 \equiv \phi' \rangle \quad (\text{IX.17})$$

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

$$\langle \phi_{k+1} | e^{-i\hat{H}\epsilon} | \phi_k \rangle \approx \langle \phi_{k+1} | (1 - iH(\hat{a}^\dagger, \hat{a})\epsilon) | \phi_k \rangle = \langle \phi_{k+1} | \phi_k \rangle \cdot (1 - iH(\bar{\phi}_{k+1}, \phi_k)\epsilon) \approx \exp(\bar{\phi}_{k+1}\phi_k - iH(\bar{\phi}_{k+1}, \phi_k)\epsilon) \quad (\text{IX.18})$$

И, наконец, для пропагатора мы получаем следующее выражение:

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int \prod_{k=1}^{N-1} d\bar{\phi}_k d\phi_k \exp \left( - \sum_{k=1}^{N-1} \bar{\phi}_k \phi_k + \sum_{k=1}^N \bar{\phi}_k \phi_{k-1} - i\epsilon \sum_{k=1}^N H(\bar{\phi}_k, \phi_{k-1}) \right) \quad (\text{IX.19})$$

Для данного выражение непосредственно строится и непрерывный предел. Интегрирование происходит по всем комплексным (для бозонов) или грассмановым (для фермионов)<sup>26</sup> функциям  $\phi(t)$  с закреплёнными концами  $\phi(t=0) = \phi'$  и  $\phi(t=T) = \phi$ ; а действие имеет следующий вид:

$$G_R(\phi, \phi', T) = \int_{\phi(0)=\phi'}^{\phi(T)=\phi} \mathcal{D}[\bar{\phi}(t), \phi(t)] \cdot e^{iS[\bar{\phi}(t), \phi(t)]}, \quad S = \int dt (i\bar{\phi} \partial_t \phi - H(\bar{\phi}(t), \phi(t))) \quad (\text{IX.20})$$

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:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{x} \frac{1}{2m} \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}) U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{y}) \hat{\psi}(\mathbf{x}), \quad (\text{IX.21})$$

и, скажем, Фейнмановский пропагатор запишется следующим образом:

$$\langle \Omega | \mathcal{T} \{ \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{y}, t') \} | \Omega \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \cdot \psi(\mathbf{x}, t) \bar{\psi}(\mathbf{y}, t') \exp(i \int dt \cdot L[\bar{\psi}, \psi])}{\int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp(i \int dt \cdot L[\bar{\psi}, \psi])} \quad (\text{IX.22})$$

<sup>26</sup>Конечно, 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.

$$L = \int d\mathbf{x} \left( i\bar{\psi}\partial_t\psi - \frac{|\nabla\psi|^2}{2m} \right) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{x}d\mathbf{y} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 |\psi(\mathbf{y}, t)|^2 U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (\text{IX.23})$$

Прелестъ 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  $\psi$  для фермионов грассмановы полностью согласуется с возникновением знака «минус» в определении  $\mathcal{T}$ -упорядочения фермионных операторов.

### 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:

$$\min_{\forall\psi: \langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle=N} \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \Leftrightarrow \min_{\forall\psi} \langle\psi|\hat{H} - \mu\hat{N}|\psi\rangle \text{ and } \langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle = N \quad (\text{IX.24})$$

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  $\mu$  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  $\mu$  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»  $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$ .

### Слабонеидеальный Бозе-газ

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:

$$\hat{H}' = \int d\mathbf{x} \left( \frac{\nabla\hat{\Psi}^\dagger\nabla\hat{\Psi}}{2m} - \mu\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi} + \frac{g}{2}\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi} \right) \quad (\text{IX.25})$$

«Статсумма» функционального интеграла имеет следующий вид:

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi] \exp \left( i \int dt d\mathbf{x} \left[ i\bar{\Psi}\partial_t\Psi - \frac{|\nabla\Psi|^2}{2m} + \mu|\Psi|^2 - \frac{g}{2}|\Psi|^4 \right] \right) \quad (\text{IX.26})$$

### Конденсат

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  $\bar{\Psi}$ , мы получаем, что седловая конфигурация удовлетворяет так называемому уравнению Гросса-Питаевского (нелинейному уравнению Шрёдингера с отталкиванием):

$$i\partial_t\psi + \frac{\Delta\psi}{2m} + \mu\psi - g|\psi|^2\psi = 0 \quad (\text{IX.27})$$

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  $\psi$  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  $\phi$ :

$$|\psi_0|^2 = \frac{\mu}{g} \Rightarrow \psi_0 = \sqrt{\frac{\mu}{g}} e^{i\phi}, \quad U_0 = -\frac{\mu^2}{2g} \quad (\text{IX.28})$$

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 рода<sup>27</sup>.

### 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-конденсации<sup>28</sup>; последняя происходит тогда, когда *макроскопически большое* (пропорциональное объёму системы) число частиц скапливается в одном квантомеханическом состоянии<sup>29</sup>. При конечных температурах она происходит тогда, когда химический потенциал  $\mu$  (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 уничтожения<sup>30</sup>:

$$|\Omega\rangle \simeq |\psi_0\rangle = \exp\left(\int d\mathbf{x} \psi_0(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x})\right) |0\rangle, \quad \hat{\Psi}(\mathbf{x}) |\psi_0\rangle = \psi_0(\mathbf{x}) |\psi_0\rangle \quad (\text{IX.29})$$

Поучительным оказывается вычисления перекрытия двух состояний с различными фазами конденсата:

$$\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 \rangle = \exp\left(e^{-i\phi} \int d\mathbf{x} |\psi_0(\mathbf{x})|^2\right) \Rightarrow P = \frac{|\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 \rangle|^2}{\langle \psi_0 e^{i\phi} | \psi_0 e^{i\phi} \rangle \cdot \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \exp(-2N(1 - \cos \phi)) \quad (\text{IX.30})$$

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.

### Звук

Для систем со спонтанным нарушением симметрии имеется утверждение, которое носит название *теоремы Голдстоуна*: каждому генератору нарушенной симметрии соответствует некоторая мягкая (то есть безщелевая  $\omega(k \rightarrow 0) \rightarrow 0$ ) мода. В Бозе-газе роль это звуковая мода с линейным законом дисперсии  $\omega(k) = ck$ , и в её наличии можно убедиться из простых термодинамических соображений. При нуле температур, *термодинамический потенциал* системы  $\Omega = F - \mu N =$

<sup>27</sup> Другим 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

<sup>28</sup> С точки зрения теории фазовых переходов Ландау, аномальное среднее является *параметром порядка* соответствующего фазового перехода

<sup>29</sup> Даже 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  $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \rightarrow \infty$ .

<sup>30</sup> Мы 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.

$E - TS - \mu N = -\frac{\mu^2}{2g}V$ ; с другой же стороны из термодинамики известно, что  $\Omega = -PV$ , поэтому давление такой системы равно  $P = \frac{\mu^2}{2g} = \frac{gn^2}{2}$ . Скорость же звука опять-же можно найти из известного термодинамического соотношения:

$$c^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{1}{m} \frac{\partial P}{\partial n} = \frac{gn}{m} = \frac{\mu}{m} \quad (\text{IX.31})$$

Поучительно продемонстрировать явно наличие такой моды с использованием формализма функционального интегрирования. Для этого предлагается сделать нелинейную(!) замену переменных в функциональном интеграле следующего вида:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{-i\varphi(\mathbf{x}, t)}, \quad (\text{IX.32})$$

и вместо интегрирования по  $\mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi]$  проводит интегрирование по всем положительным функциям  $\rho(\mathbf{x}, t) > 0$  и по всем функциям  $\varphi(\mathbf{x}, t) \in U(1)$  (фазы  $\varphi$  и  $\varphi + 2\pi$  тождественны!). В общем случае замена переменных в функциональном интеграле может привести к возникновению ненулевого *якобиана перехода*. Однако данная конкретная замена имеет единичный якобиан, в чём можно убедиться, вернувшись с дискретному представлению в пространстве-времени:

$$d\bar{\Psi}d\Psi = d(\text{Re}\Psi)d(\text{Im}\Psi) = |\Psi|d(|\Psi|)d(\arg\Psi) = \sqrt{\rho} \frac{d\rho}{2\sqrt{\rho}} d\varphi = \frac{1}{2} d\rho d\varphi \Rightarrow \mathcal{D}[\bar{\Psi}, \Psi] \equiv \mathcal{D}[\rho, \varphi] \quad (\text{IX.33})$$

(как обычно, константа 1/2 нас совершенно не интересует — она войдёт в нормировку). Непосредственной подстановкой мы получаем следующий Лагранжиан:

$$S[\varphi, \rho] = \int dt d\mathbf{x} \left[ \overset{0}{\frac{i}{2} \partial_t \rho} + \rho \partial_t \varphi - \frac{1}{2m} \left( \frac{(\nabla \rho)^2}{4\rho} + \rho (\nabla \varphi)^2 \right) + \mu \rho - \frac{g}{2} \rho^2 \right] \quad (\text{IX.34})$$

(первый член является полной производной и нас не интересует). Из такого представления видно, что фаза и плотность являются канонически сопряжёнными координатой и импульсом:  $\rho = \frac{\partial L}{\partial(\partial_t \varphi)}$ ; поэтому можно было бы продолжить рассмотрение, используя операторный формализм с следующим гамильтонианом, описывающим уже *коллективные возбуждения*:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \frac{(\nabla \rho)^2}{4\rho} + \rho (\nabla \varphi)^2 \right) - \mu \rho + \frac{g}{2} \rho^2, \quad [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\rho}(\mathbf{y})] = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (\text{IX.35})$$

Мы же пройдём чуть дальше и разложимся вблизи седла  $\rho = \rho_0 + \delta\rho$  до квадратичного порядка по  $\delta\rho$  и производным фазы  $\varphi$ :

$$S[\varphi, \delta\rho] = \int dt d\mathbf{x} \left[ \delta\rho \cdot \partial_t \varphi - \frac{1}{8m\rho_0} (\nabla \delta\rho)^2 - \frac{g}{2} \delta\rho^2 - \frac{\rho_0}{2m} (\nabla \varphi)^2 \right] \quad (\text{IX.36})$$

Теперь мы можем взять Гауссов функциональный интеграл по флуктуациям плотности, чтобы получить эффективное действие, описывающее флуктуации фазы. Интеграл устроен как гауссов источником  $\partial_t \varphi$ , и, как мы помним из предыдущего семинара, ответ выражается через функцию Грина соответствующей квадратичной части:

$$\int \mathcal{D}\delta\rho \cdot \exp \left( i \int dt d\mathbf{x} \left( -\frac{1}{2} \left[ \frac{1}{4m\rho_0} (\nabla \delta\rho)^2 + g \cdot \delta\rho^2 \right] + \delta\rho \partial_t \varphi \right) \right) = \exp \left( \frac{i}{2} \int dt d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \cdot \partial_t \varphi(\mathbf{x}_1, t) G(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \partial_t \varphi(\mathbf{x}_2) \right) \quad (\text{IX.37})$$

В длинноволновом пределе можно записать  $G^{-1}(\mathbf{k}) = g + \frac{k^2}{4m\rho_0} \approx g \Rightarrow G(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{g} \delta(\mathbf{x})$ ; поэтому после Гауссового интегрирования по плотности мы приходим к следующему действию для флуктуаций фазы:

$$S[\varphi] = \frac{1}{2} \int dt d\mathbf{x} \left[ \frac{1}{g} (\partial_t \varphi)^2 - \frac{\rho_0}{m} (\nabla \varphi)^2 \right] \quad (\text{IX.38})$$

Если отвлечься от того, что фаза определена с точностью до<sup>31</sup>  $2\pi$  (что соответствует тому, что флуктуации фазы мы предполагаем маленькими), то мы получили нашу любимую безмассовую теорию Клейна-Гордона. Тот факт, что она

<sup>31</sup>На самом деле, это имеет далеко идущие последствия. В такой системе имеются точечные топологические возбуждения, при обходе вокруг которых фаза меняется на  $2\pi$  — вихревые нити, с которыми связана очень интересная физика, но которая всё-же выходит за рамки нашего курса.

зависит только от производных фазы и не зависит от самой фазы явно, конечно же, связан с той самой  $U(1)$  симметрией. «Скорость света» же в этой теории равна скорости звука  $c^2 = \frac{\rho_0 g}{m} = \frac{\mu}{m}$  — что совпадает с полученным ранее из термодинамических соображений. Полученная безщелевая мода тем самым связана с длинноволновыми флуктуациями фазы конденсата.

## Литература

[AltlandSimons, Глава 4 «Functional field integral» и глава 6.3 «Bose-Einstein condensation and superfluidity»]

## Задачи

### Упражнение 1. Преобразование Боголюбова

Пусть есть пара состояний, описываемых лестничными операторами  $\{\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger\}$  и  $\{\hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger\}$ . Рассмотрите линейные преобразования вида:

$$\hat{B} = U\hat{A}, \quad U = \begin{pmatrix} u & v \\ v' & u' \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \hat{a}_2^\dagger \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{IX.39})$$

1. При каком условии на матрицу  $U$  (на числа  $u, v, u', v'$ ) такое преобразование, носящее название преобразования Боголюбова, является каноническим — сохраняет коммутационные соотношения? Рассмотрите бозонный и фермионный случай.
2. Рассмотрите преобразования Боголюбова с вещественными коэффициентами. Покажите, что матрицу  $U$  можно явно параметризовать в терминах тригонометрических функций  $\sin, \cos$  (для фермионов) и  $\sinh, \cosh$  (для бозонов).

### Упражнение 2

Используя преобразование Боголюбова, диагонализуйте следующий гамильтониан:

$$\hat{H} = \omega(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) + \Delta(\hat{a}_1 \hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger), \quad \omega > \Delta \quad (\text{IX.40})$$

Рассмотрите бозонный и фермионный случай.

### Задача 1. Теория Боголюбова для разреженного Бозе-газа

В данной задаче мы будем рассматривать слабонеидеальный Бозе-газ, описываемый следующим гамильтонианом (в рамках большого канонического ансамбля с химическим потенциалом  $\mu$ ):

$$\hat{H}' \equiv \hat{H} - \mu \hat{N} = \int dx \left( \frac{\nabla \hat{\Psi}^\dagger \nabla \hat{\Psi}}{2m} - \mu \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \right) \quad (\text{IX.41})$$

1. Используя формализм функционального интеграла, найдите «седло», соответствующее спонтанному нарушению  $U(1)$  симметрии — «конденсатное» решение  $\psi_0(\mathbf{x})$ . Для простоты можете выбрать его вещественным.
2. Квадратичные флуктуации в окрестности этого «седла» соответствуют квазичастицам — они соответствуют элементарным возбуждениям системы. Чтобы их найти, предлагается использовать формализм вторичного квантования; для этого рассмотрите каноническое преобразование полевых операторов  $\hat{\Psi}(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \hat{\psi}(\mathbf{x})$ , после чего гамильтониан  $\hat{H}'$  разложите до квадратичного порядка по  $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ .
3. Для диагонализации полученного гамильтониана первым шагом стандартным образом перейдите к преобразованию Фурье  $\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$ . После такой подстановки, в гамильтониане должны возникнуть «аномальные» члены, не сохраняющие число частиц — вида  $\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}$ .
4. Используя преобразование Боголюбова (см. упражнение) вида  $\hat{a}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger$ , диагонализуйте полученный гамильтониан, приведя его к виду  $\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \xi_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} + \text{const}$ . Найдите спектр квазичастичных возбуждений  $\xi_{\mathbf{p}}$ .
5. Вычислите среднее число надконденсатных частиц  $N_1 = \langle \hat{N}_1 \rangle = \int dx \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \rangle$ . В процессе решения мы предполагали, что практически все частицы находятся в конденсате, поэтому построенная тут теория работает только если  $N_1 \ll N$ . Для выяснения физического смысла полученного критерия, удобно параметризовать константу связи  $g$  через длину рассеяния  $a$  согласно<sup>32</sup>  $g = \frac{4\pi a}{m}$ .

<sup>32</sup>Длина рассеяния — это характеристика задачи рассеяния. Она определяется как амплитуда рассеяния медленных частиц в  $s$ -канале —  $f(\theta) \approx f_{l=0} = -a$  ( $E \rightarrow 0$ ); и через неё выражается сечение рассеяния согласно  $\sigma = 4\pi a^2$ . Стоит только отметить, что в данном случае мы имеем дело с рассеянием тождественных частиц, из-за чего некоторые стандартные формулы из задачи рассеяния требуют модификации.



## Лекция X

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

## Однородный случай

В рамках теории Ландау свободная энергия представляет собой функцию параметра порядка; причём в окрестности фазового перехода, параметр порядка мал — что позволяет разложить в ряд свободную энергию в ряд Тейлора. При этом полученная свободная энергия должна уважать все симметрии, которые имеет исходный параметр порядка — 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.

Мы будем рассматривать модель Изинга, где параметр порядка — спонтанная намагниченность  $\varphi = \langle \sigma_z \rangle$  — однокомпонентный, и обладающий единственной симметрией  $\varphi \mapsto -\varphi$ . Поэтому свободная энергия в общем виде раскладывается следующим образом:

$$\mathcal{F}(\phi) = \frac{1}{2}a\phi^2 + \frac{1}{4!}b\phi^4 + \dots \quad (\text{X.1})$$

Параметры разложения  $a$  и  $b$ , в свою очередь, являются функциями всех остальных параметров системы — температуры, и т.п.; мы также предполагаем их аналитичность. Как мы увидим далее, в точке фазового перехода коэффициент  $a(T_c)$  должен зануляться — поэтому мы предполагаем его линейную зависимость от температуры  $a(T) = \alpha(T - T_c)$ . При  $a > 0$  и  $b > 0$ , у свободной энергии имеется единственный минимум,  $\varphi = 0$ ; а при  $a < 0$ ,  $b > 0$  — этих минимума два,  $\varphi = \pm \sqrt{\frac{6|a|}{b}}$ , что соответствует нашим представлениям о спонтанном нарушении симметрии. Из этого мы заключаем, что в окрестности  $T_c$  в теории Ландау параметр порядка ведёт себя корневым образом (соответствующий критический индекс тем самым  $\beta = \frac{1}{2}$ ):

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

Свободная энергия, связанная с параметром порядка, тем самым ведёт себя следующим образом:

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

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

$$C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \Rightarrow \Delta C = -\frac{3\alpha^2}{b} \quad (\text{X.4})$$

Можно также ввести внешнее поле — член  $-h\varphi$ , и рассмотреть восприимчивость  $\chi = \frac{\partial \langle \varphi \rangle}{\partial h}$  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  $\varphi = (6h/b)^{1/3}$ , поэтому критический индекс  $\delta = 3$ .

## Пространственные и температурные флуктуации

Можно также учесть тот факт, что параметр порядка, вообще говоря, может меняться в пространстве. Таким «изгибным» деформациям должна соответствовать некоторая положительная энергия — ведь, как правило, минимум соответствует однородному параметру порядка. Кроме того, параметр порядка является *макроскопической величиной* и должен меняться на больших масштабах — поэтому свободную энергию также можно разложить по градиентам  $\nabla\varphi$ . Это позволяет записать следующий функционал Ландау, учитывающий также и неоднородность параметра порядка:

$$\mathcal{F}[\varphi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left[ \frac{1}{2}(a\varphi^2 + c(\nabla\varphi)^2) + \frac{1}{4!}b\varphi^4 \right] \quad (\text{X.5})$$

В термодинамике все величины, вообще говоря, испытывают флуктуации вокруг своего среднего значения, даваемого минимумом свободной энергии. Из термодинамики же известно, что вероятность флуктуации пропорциональна  $\exp\left(-\frac{\mathcal{F}[\varphi(\mathbf{r})]}{T}\right)$ . Поэтому учёт температурных и пространственных флуктуаций приводит к появлению «квантовой» теории поля со следующей статсуммой:

$$Z = \int \mathcal{D}\varphi \exp\left(-\frac{\mathcal{F}[\varphi]}{T}\right) \quad (\text{X.6})$$

Для исследования свойств полученного объекта применяется аппарат квантовой теории поля — в частности, диаграммная техника, и т.п. Например, можно вычислить корреляционную функцию параметра порядка при температуре  $T > T_c$ . Пренебрегая членом  $\varphi^4$ , мы получаем Гауссов функциональный интеграл — и для вычисления коррелятора достаточно обратить соответствующий дифференциальный оператор. Получаем:

$$G(\mathbf{k}) = \frac{T}{a + ck^2} \Rightarrow G(\mathbf{r}) = \frac{T}{4\pi c} \cdot \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad \xi = \sqrt{\frac{c}{a}} \propto (T - T_c)^{-1/2} \quad (\text{X.7})$$

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

## Применимость

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  $\varphi^4$  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  $\epsilon$ -разложения — для вычисления, например, критических индексов рассматривается система в пространстве размерности  $4 - \epsilon$  ( $\epsilon \ll 1$ ), а затем полученный асимптотический ряд по  $\epsilon$  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.)

## Литература

[Лебедев, Глава 1 «Теория Ландау»]

# Задачи

## Задача 1. Флуктуационная теплоёмкость

Рассмотрите теорию Ландау для модели Изинга со следующим функционалом свободной энергии:

$$\mathcal{F}[\varphi] = \int d\mathbf{x} \left[ \frac{1}{2}(a\varphi^2 + c(\nabla\varphi)^2) + \frac{1}{4!}b\varphi^4 \right] \quad (\text{X.8})$$

В рамках среднеполевого рассмотрения, реальная свободная энергия  $F(T)$  даётся просто минимумом

$$F = \min_{\varphi} \mathcal{F}[\varphi]. \quad (\text{X.9})$$

С другой стороны, температурные флуктуации параметра порядка приводят к тому, что и сама свободная энергия модифицируется, и на самом деле она даётся формулой  $F = -T \ln Z$ , или:

$$e^{-F/T} = \int \mathcal{D}\varphi \exp\left(-\frac{\mathcal{F}[\varphi]}{T}\right) \quad (\text{X.10})$$

Минимум тем самым соответствует просто взятию функционального интеграла методом перевала в пренебрежении квадратичными флуктуациями в окрестности седла. Учёт флуктуаций приводит к изменению характера зависимости теплоёмкости в окрестности фазового перехода. В данной задаче предлагается найти этот характер и вычислить критический индекс теплоёмкости  $\alpha$ .

1. В Гауссовом приближении, возьмите функциональный интеграл по  $\varphi$  при  $T > T_c$ . Нормировочная константа, которая обычно присутствует в функциональном интеграле, приводит к произвольной константной добавке к свободной энергии — нас она не интересует. Сама свободная энергия оказывается ультрафиолетовой, и поэтому в рамках теории Ландау найти её не представляется возможным.
2. Теплоёмкость определяется как  $C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$ . При дифференцировании по температуре возникает несколько членов, причём некоторые из них ультрафиолетовые, а некоторые — конечные. Покажите, что ультрафиолетовые члены *менее сингулярны* при  $T \rightarrow T_c$ , а самый сингулярный член конечен. Вычислите его в пространстве размерности  $d = 1, 2, 3$  и найдите критические индексы теплоёмкости  $C \propto (T - T_c)^{-\alpha}$ . Полученная зависимость  $C(T)$  (с учётом «нулевого приближения», которое давало скачок теплоёмкости), если её нарисовать, похожа на греческую букву  $\lambda$ , поэтому её называют  $\lambda$ -точкой.
3. Повторите вычисление при  $T < T_c$ , раскладываясь в окрестности нетривиального седла со спонтанно нарушенной симметрией  $\langle \varphi \rangle = \varphi_0 = \text{const}$ .

## Список литературы

[ПШ] М.Е. Пескин, Д.В. Шрёдер, “Введение в квантовую теорию поля”, 2001.

[Зи] Э. Зи, “Квантовая теория поля в двух словах”, 2009.

[ЛШ] Л.С. Левитов, А.В. Шитов, “Функции Грина. Задачи и решения.”, 2003.

[AltlandSimons] Alexander Altland and Ben Simons, “*Condensed Matter Field Theory*” (Second Edition), Cambridge University Press, 2010

[Лебедев] В.В. Лебедев, “Флуктуационные эффекты в макрофизике”

[ЛЛЗ] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, “Квантовая механика (нерелятивистская теория)”, 5-е изд., ФИЗМАТЛИТ, 2002