

Вторичное квантование. Теория представлений.

Пространство чисел заполнения.

Рассмотрим систему из N невзаимодействующих частиц, описываемую гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\xi_i) \right) = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i, \text{ где } \xi_i = (\vec{r}_i, \sigma_i). \quad (4.1)$$

Для невзаимодействующих частиц решение проблемы N тел можно свести к одночастичной задаче – решению системы независимых уравнений Шредингера

$$\hat{h}_i \varphi_i(\xi_i) = \varepsilon_i \varphi_i(\xi_i)$$

При этом полная энергия системы определяется суммой одночастичных энергий ε_i , а одночастичные состояния описываются одночастичными волновыми функциями $\varphi_i(\xi_i)$, которые образуют полную ортонормированную систему $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$.

Полная волновая функция системы выражается через произведения одночастичных волновых функций с соответствующими свойствами симметрии для бозонов (1.8) и фермионов (1.11).

Эти состояния можно записывать в **представлении чисел заполнения**.

Каждой одночастичной волновой функции можно привести в соответствие число, показывающее число частиц, находящихся в этом состоянии, т.е. состояние всей системы можно задать *числами заполнения*: $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$

$$n_1, n_2, n_3, \dots$$

где n_i – число частиц в квантовом состоянии i , описываемом волновой функцией ϕ_i . Любому произведению одночастичных волновых функций можно сопоставить вектор (в так называемом *пространстве Фока*) $\phi_1 \cdot \phi_2 \cdot \phi_3 \cdot \dots \cdot \phi_N \sim |n_1 n_2 n_3 \dots n_N\rangle$.

Для фермионов число n_i может принимать значения 0 или 1, а для бозонов n_i – любое целое число от 0 до N .

В пространстве чисел заполнения необходимо определить операторы, через которые можно записать гамильтониан и другие операторы. Это так называемые **операторы рождения и уничтожения** частиц.

Операторы рождения и уничтожения бозонов.

Будем рассматривать волновую функцию (1.8) как функцию переменных n_1, n_2, \dots

$$\Phi_{n_1 n_2 \dots} = \left(\frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_P |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle, \quad (4.2)$$

где суммирование производится по всем возможным перестановкам различных чисел (номеров состояний) p_j .

Определим операторы уничтожения и рождения:

$$\hat{a}_k |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k} |n_1, \dots, n_k - 1, \dots\rangle \quad (4.3a)$$

$$\hat{a}_k^+ |n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_1, \dots, n_k + 1, \dots\rangle \quad (4.3b)$$

Оператор уничтожения (4.3a) убирает одну частицу в состоянии k , оператор рождения (4.3b) добавляет одну частицу в состояние k .

Для них выполняются соотношения коммутативности, которые можно получить, подействовав операторами уничтожения и рождения по очереди на волновую функцию:

$$\begin{aligned} \hat{a}_k \hat{a}_k^+ |n_k\rangle &= \hat{a}_k \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle = (n_k + 1) |n_k\rangle \\ \hat{a}_k^+ \hat{a}_k |n_k\rangle &= \hat{a}_k^+ \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle = n_k |n_k\rangle \end{aligned}$$

После вычитания из верхнего уравнения нижнего: $(\hat{a}_k \hat{a}_k^+ - \hat{a}_k^+ \hat{a}_k) |n_k\rangle = |n_k\rangle$

Таким образом, коммутатор для бозонов равен единице $[\hat{a}_k, \hat{a}_k^+] = 1$.

Аналогично можно получить более общие соотношения:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^+] &= \delta_{kk'} \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] &= 0 \\ [\hat{a}_k^+, \hat{a}_{k'}^+] &= 0 \end{aligned} \quad (4.4)$$

В представлении вторичного квантования могут быть записаны и другие операторы.

Пусть есть некоторый оператор F действует на волновую функцию (4.2), он может быть представлен как сумма *одночастичных* операторов:

$$\hat{F} = \sum_{\nu} \hat{f}_{\nu}^{(1)},$$

где $\hat{f}_{\nu}^{(1)}$ действует только на координату ξ_{ν} . Такой оператор, действуя на функцию (4.2), переводит ее либо в ту же самую функцию, либо в другую, соответствующую изменению состояния *одной из частиц*. Тогда его матричные элементы могут быть представлены:

$$\begin{aligned} \langle n_i | \hat{F} | n_i \rangle &= \sum_i f_{ii}^{(1)} n_i \quad - \text{диагональные} \\ \langle n_i, n_k - 1 | \hat{F} | n_i - 1, n_k \rangle &= \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \sqrt{n_i n_k} \quad - \text{недиагональные} \end{aligned} \quad (4.5)$$

где одночастичные матричные элементы $f_{ik}^{(1)} = \int \phi_i^*(\xi) \hat{f}^{(1)} \phi_k(\xi) d\xi$.

Тогда в представлении вторичного квантования оператор F может быть представлен:

$$\hat{F} = \sum_{ik} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \quad (4.6)$$

Также можно ввести *оператор числа частиц* в состоянии i : $\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$.

Аналогично можно ввести *двухчастичный* оператор $\hat{G} = \sum_{\mu, \nu} \hat{f}_{\mu\nu}^{(2)}$, где $\hat{f}_{\mu\nu}^{(2)}$ действует на функции от переменных ξ_{μ} и ξ_{ν} .

В представлении вторичного квантования он может быть представлен в виде:

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{iklm} f_{lm}^{(2)ik} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \hat{a}_m \quad (4.7)$$

где $f_{lm}^{(2)ik} = \int \phi_i^*(\xi_1) \phi_k^*(\xi_2) \hat{f}^{(2)} \phi_l(\xi_1) \phi_m(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2$.

Операторы рождения и уничтожения для фермионов.

Полная волновая функция антисимметрична по всем переменным – Слэтеровский детерминант (1.11):

$$\Phi_{n_1 n_2 \dots} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \phi_{p_1}(\xi_1) \phi_{p_2}(\xi_2) \dots \phi_{p_N}(\xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$$

Числа заполнения n_i могут принимать значения лишь 0 или 1, все квантовые числа p_i разные. Символ $(-1)^P$ показывает, что нечетные перестановки входят со знаком минус.

Можно записать вектор-детерминант N уровней, где имеется состояние ϕ_k , в виде $|\dots, 1_k, \dots\rangle$. Аналогично, многочастичный детерминант, где отсутствует состояние ϕ_k , в виде $|\dots, 0_k, \dots\rangle$ может быть получен из первого *вычеркиванием* соответствующей строки (и столбца) k -го уровня и соответствующим изменением нормировки.

Введем **оператор уничтожения**: $\hat{a}_k |\dots 1_k \dots\rangle = (-1)^m |\dots 0_k \dots\rangle$, где m – число заполненных уровней, предшествующих уровню k в векторе состояния, т.е. сумма чисел заполнения до k уровня $m = \sum (1, k-1)$. Его действие на незаполненное состояние: $\hat{a}_k |\dots 0_k \dots\rangle = 0$.

Аналогично, **оператор рождения**: $\hat{a}_k^+ |\dots 0_k \dots\rangle = (-1)^m |\dots 1_k \dots\rangle$ и $\hat{a}_k^+ |\dots 1_k \dots\rangle = 0$.

В отличие от случая бозонов (4.4), фермионные операторы *антикоммумутативны*:

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i^+ = \delta_{ik}$$

или в более общей форме записи: $\{\hat{a}_i^+ \hat{a}_k\} = \delta_{ik}$

$$\{\hat{a}_i \hat{a}_k\} = \{\hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+\} = 0$$

(4.8)

Как и для бозонов (4.6), матричные элементы некоторого оператора, действующего на систему фермионов, могут быть записаны в представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} \langle n_i | \hat{F}^{(1)} | n_i \rangle &= \sum_i f_{ii}^{(1)} n_i \quad - \text{диагональные} \\ \langle \dots 1_i, \dots, 0_k \dots | \hat{F}^{(1)} | \dots 0_i, \dots, 1_k \dots \rangle &= \sum_{i,k} (-1)^{\sum(i+1, k-1)} f_{ik}^{(1)} \sqrt{n_i n_k} \quad - \text{недиагональные } (k > i) \end{aligned} \quad (4.9)$$

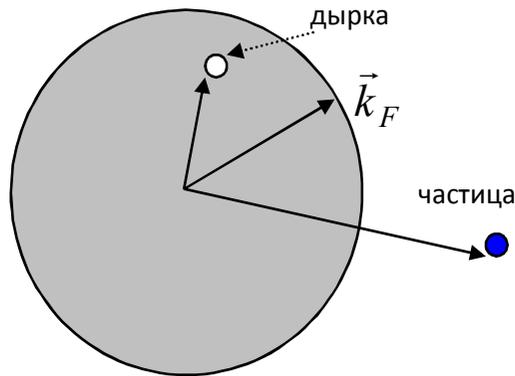
Описание фермионов как частиц-дырок.

Вакуумное состояние можно записать в пространстве чисел заполнения (Фока) в виде

$$\Psi_{vac} = |0000\dots 0\rangle$$

Волновая функцию одной частицы в k -ом состоянии $|\dots 1_k \dots\rangle = (-1)^{\sum(1, k-1)} \hat{a}_k^+ |\dots 0_k \dots\rangle$.

В пространстве импульсов или волновых векторов k вакуумное (основное) состояние системы выглядит в виде сферы радиуса k_F .



Влияние взаимодействий – есть перевод некоторых частиц из состояний с $k < k_F$ в состояния с большими значениями импульса $k > k_F$. При этом имеет смысл лишь *отклонение* импульсного распределения от первоначального распределения Ферми.

При этом удобно ввести термин **частица-дырка**.

Схематичное изображение Ферми-сферы и рождение пары частица-дырка.

Введем новые **операторы уничтожения и рождения квазичастиц** типа частица-дырка:

$$\hat{b}_k = \begin{cases} \hat{a}_k & (k > k_F) \\ \hat{a}_k^+ & (k < k_F) \end{cases} \quad \text{– уничтожили частицу, создали дырку}$$

$$\hat{b}_k^+ = \begin{cases} \hat{a}_k^+ & (k > k_F) \\ \hat{a}_k & (k < k_F) \end{cases} \quad \text{– уничтожили дырку, создали частицу}$$
(4.10)

Эти операторы также антикоммумутативны (4.8) и описывают рождение и уничтожение квазичастиц. Частицы под поверхностью Ферми – пассивные частицы и не участвуют в процессах взаимодействия, откуда не выходят из-под сферы Ферми и не рождается новая квазичастица (частица-дырка). Для волновой функции основного состояния фермионов $|g\rangle = \prod_{k < k_F} \hat{a}_k^+ |0\rangle$ выполняется $\hat{b}_k |g\rangle = 0$ (нечего “уничтожать”). Заполненная сфера Ферми играет роль *вакуумного состояния*. Состояние, изображенное на рисунке, записывается как $\hat{b}_k^+ \hat{b}_{k'}^+ |g\rangle$.

Полевые операторы рождения и уничтожения.

Аппарат вторичного квантования можно представить в несколько иной форме.

Введем **операторы поля** частиц:

$$\hat{\psi}(x) = \sum_i \phi_i(x) \cdot \hat{a}_i$$

$$\hat{\psi}^+(x) = \sum_i \phi_i^*(x) \cdot \hat{a}_i^+$$
(4.11)

где x зависит от выбранного представления – координаты, импульса и т.д., $\phi_i(x)$ – волновая функция частицы в состоянии i . Суммирование ведется по полному набору одночастичных состояний.

Операторы поля $\hat{\psi}(x)$ и $\hat{\psi}^+(x)$ - операторы **уничтожения и рождения частицы в данной точке пространства x** (в отличие от операторов рождения и уничтожения частицы в данном квантовом состоянии). Для них также выполняются правила коммутации:

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x') \mp \hat{\psi}^+(x')\hat{\psi}(x) &= \delta(x - x') \\ \hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x') \mp \hat{\psi}(x')\hat{\psi}(x) &= 0 \\ \hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}^+(x') \mp \hat{\psi}^+(x')\hat{\psi}^+(x) &= 0\end{aligned}\tag{4.12}$$

где верхний знак соответствует статистике Бозе, а нижний – статистике Ферми.

Оператор, в представлении вторичного квантования имевший вид (4.6), теперь может быть представлен в виде:

$$\hat{F} = \int \hat{\psi}^+(x) f^{(1)} \hat{\psi}(x) dx\tag{4.13}$$

Примеры операторов в представлении операторов поля:

1) **Гамильтониан** Ферми-системы

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \hat{\psi}_{\alpha}^+(\vec{r}) \nabla \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\alpha}^+(\vec{r}) \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) \right] d\vec{r} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \iint \hat{\psi}_{\alpha}^+(\vec{r}) \hat{\psi}_{\beta}^+(\vec{r}') U(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\beta}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}' + \dots$$

2) Оператор **плотности частиц**: $n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \int \hat{\psi}_{\alpha}^+(\vec{r}_a) \delta(\vec{r} - \vec{r}_a) \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}_a) d\vec{r}_a = \sum_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^+(\vec{r}) \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r})$

3) Оператор **числа частиц**: $\hat{N} = \int \hat{n}(\vec{r}) d\vec{r} = \sum_{\alpha} \int \hat{\psi}_{\alpha}^+(\vec{r}) \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}) d\vec{r}$

С помощью операторов поля введем **функцию Грина** как **амплитуду перехода** частицы из состояния с координатами \vec{r}, t в состояние с координатами \vec{r}', t' .

Представление Шредингера.

При описании **временной зависимости** состояния системы в представлении Шредингера операторы от времени не зависят, а вся временная зависимость сосредоточена в волновых функциях. Для решения уравнения Шредингера в нестационарном виде (1.1),

$$i\hbar \frac{\partial \psi_S(x,t)}{\partial t} = \hat{H}(t) \psi_S(x,t), \quad (4.14)$$

необходимо задать начальное условие $\psi_S(t_0)$. Развитие процесса во времени, т.е. *эволюцию волновой функции во времени* можно представить как результат действия на начальное состояние некоторого оператора, называемого **оператором эволюции**:

$$\psi_S(x,t) = \hat{U}(t,t_0) \psi_S(x,t_0) \quad (4.15)$$

Оператор эволюции удовлетворяет уравнению, аналогичному (4.14),

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t,t_0) \quad (4.16)$$

при начальном условии $\hat{U}(t_0,t_0) = 1$. Решением уравнения (4.16) формально является

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right) \quad (4.17)$$

где экспонента понимается в смысле разложения в степенной ряд:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right) = 1 - \frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar} + \frac{1}{2!} \left[\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right]^2 - \frac{1}{3!} \left[\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right]^3 - \dots$$

Свойства оператора эволюции :

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

$$\hat{U}(t_0, t) = \hat{U}^+(t, t_0)$$

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$$

$$\hat{U}^+(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t, t_0)$$

(4.18)

То есть, оператор эволюции *эрмитов* и *унитарен*. Свойство $\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{U}^{-1} \hat{U} = 1$ необходимо, чтобы сохранялась во времени нормировка волновой функции:

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \hat{U} \psi(t_0) | \hat{U} \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^+ \hat{U} | \psi(t_0) \rangle = 1$$

Итак, **представление Шредингера обладает следующими свойствами:**

- 1) Волновая функция зависит от времени $\psi_S(x, t)$, ее эволюция задается с помощью унитарного оператора (4.17), действующего на начальную волновую функцию $\psi_S(x, t_0)$.
- 2) Все операторы, характеризующие систему, явно от времени не зависят.

Геометрическая интерпретация: есть набор ортов - собственных векторов (функций) операторов, образующих полный набор для данной системы. В начальный момент $t = t_0$ состояние системы определяется вектором состояния $\psi_S(x, t_0)$. Эволюция системы во времени отвечает повороту вектора ψ , при этом его длина $\langle \psi | \psi \rangle$ остается постоянной.

Представление Гейзенберга.

В представлении Гейзенберга **временная зависимость переносится с волновых функций на операторы**. Волновые функции (векторы состояния) при этом от времени не зависят.

Геометрическая интерпретация: в представлении Шредингера вращается вектор состояния, в представлении Гейзенберга – базис. При эволюции системы со временем происходит поворот системы базисных векторов относительно неподвижного вектора состояния.

Физически это одно и то же, все результаты (т.е. матричные элементы) должны совпадать для обоих представлений (“S” – Шредингера, “H” – Гейзенберга).

Эволюция во времени матричного элемента некоторого оператора F :

$$F_{ik}(t) = \langle \psi_i(t) | \hat{F}_S | \psi_k(t) \rangle = \langle \hat{U}(t, t_0) \psi_{i0} | \hat{F}_S | \hat{U}(t, t_0) \psi_{k0} \rangle = \langle \psi_{i0} | \hat{U}^+(t, t_0) \hat{F}_S \hat{U}(t, t_0) | \psi_{k0} \rangle = \langle \psi_{i0} | \hat{F}_H(t) | \psi_{k0} \rangle$$

где оператор в представлении Гейзенберга зависит от времени:

$$\hat{F}_H(t) = \hat{U}^+(t, t_0) \hat{F}_S \hat{U}(t, t_0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)\right] \hat{F}_S \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)\right], \text{ где } \hat{F}_H(t = t_0) = \hat{F}_S \quad (4.19)$$

Уравнение **временной эволюции для оператора A** в представлении Гейзенберга:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{F}_H}{dt} &= \frac{d}{dt} \left[\hat{U}^+(t, t_0) \hat{F}_S \hat{U}(t, t_0) \right] = \frac{d\hat{U}^+(t, t_0)}{dt} \left[\hat{F}_S \hat{U}(t, t_0) \right] + \hat{U}^+(t, t_0) \hat{F}_S \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}^+(t, t_0) \hat{F}_S \hat{U}(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \hat{U}^+(t, t_0) \hat{F}_S \hat{H} \hat{U}(t, t_0) = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H} \hat{F}_H - \hat{F}_H \hat{H} \right] = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{F}_H \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

Уравнение вида (4.20) $\frac{d\hat{F}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{F}_H \right]$ называется **уравнением движения**.

Важно, что гамильтонианы будут одинаковыми в обоих представлениях:

$$\hat{H}_H = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{H}_S \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) = \hat{H}_S \equiv \hat{H}$$

Также в обоих представлениях матричные элементы (т.е. **вероятности переходов** между состояниями под действием оператора F) оказываются одинаковыми. Пусть $t_0 = 0$.

1) В представлении Шредингера:

$$\langle \psi_2(t) | \hat{F}(0) | \psi_1(t) \rangle = \langle \psi_2(t) | \hat{F}_S | \psi_1(t) \rangle = \langle \psi_2(0) e^{i\hat{H}t} | \hat{F}_S | e^{-i\hat{H}t} \psi_1(0) \rangle = F_{21}(t) \quad (4.21)$$

2) В представлении Гейзенберга:

$$\langle \psi_2(0) | \hat{F}_H(t) | \psi_1(0) \rangle = \langle \psi_2(0) | e^{i\hat{H}t} \hat{F}_H(0) e^{-i\hat{H}t} | \psi_1(0) \rangle = \langle \psi_2(0) e^{i\hat{H}t} | \hat{F}_S | e^{-i\hat{H}t} \psi_1(0) \rangle = F_{21}(t) \quad (4.22)$$

Таким образом, когда в гамильтониан добавляется какое-либо новое взаимодействие V :

1) В представлении Шредингера операторы остаются постоянными, а оператор V влияет на волновую функцию, приводя к новым, зависящим от времени матричным элементам, полученным со *старыми операторами, но новыми волновыми функциями*.

2) В представлении Гейзенберга взаимодействие меняет операторы, оставляя волновые функции неизменными, что приводит к новым матричным элементам, полученным со *старыми волновыми функциями и новыми операторами*.

Представление взаимодействия.

Именно это представление положено в основу квантовой теории систем многих частиц. В представлении взаимодействия **и операторы и волновые функции зависят от времени**. Часто полный гамильтониан системы можно представить в виде суммы “невозмущенного” гамильтониана и “возмущения”, оператор которого может описывать взаимодействие между частицами: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}$.

Определим **волновую функцию в представлении взаимодействия (I)** преобразованием:

$$\psi_I(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \psi_S(x, 0) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) \psi_H(x) \quad (4.23)$$

Важно, что под одной экспонентой записать операторы \hat{H}_0 и $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}$ нельзя, поскольку в общем случае они не коммутируют.

Также определим произвольный **оператор в представлении взаимодействия** :

$$\hat{F}_I(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \hat{F}_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \quad (4.24)$$

В отличие от Гейзенберговского представления в экспоненту входит не полный гамильтониан, а лишь его *невозмущенная часть* !

При этом матричный элемент определяющий вероятность перехода между квантовыми состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ под действием оператора F , оказывается равен значениям, полученным в Шредингеровском (4.21) и Гейзенберговском (4.22) представлениях.

Проверка: $\langle \psi_2(t) | \hat{F}_I(t) | \psi_1(t) \rangle =$

$$= \left\langle \psi_2(0) \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}\right) \left| \exp\left(\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}\right) \hat{F}_S \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}\right) \right| \exp\left(\frac{i\hat{H}_0t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \psi_1(0) \right\rangle =$$

$$= \left\langle \psi_2(0) \exp\left(\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \left| \hat{F}_S \right| \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right) \psi_1(0) \right\rangle = F_{21}(t) \quad (4.25)$$

Уравнение временной эволюции (уравнение движения) аналогично уравнению (4.20) для представления Гейзенберга:

$$\frac{d\hat{F}_I}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{F}_I] \quad (4.26)$$

Таким образом, **временная эволюция операторов** динамических переменных в представлении взаимодействия обусловлена только "невозмущенным" гамильтонианом.

Уравнение для **эволюции волновой функции** $\psi_I(x, t)$ в представлении взаимодействия,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_I(t)}{\partial t} = \hat{H}_{\text{int}}(t) \psi_I(t), \quad (4.27)$$

имеет вид, подобный уравнению (4.14), с **зависящим от времени гамильтонианом** в представлении взаимодействия

$$\hat{H}_{\text{int}I}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \hat{H}_{\text{int}S} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right). \quad (4.28)$$

Таким образом, состояние системы меняется во времени за счет компоненты полного гамильтониана, отвечающей за **взаимодействие** частиц. При этом все операторы имеют тот же вид, что и Гейзенберговские операторы для невзаимодействующей системы, а волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера с гамильтонианом \hat{H}_{int} .

Аналогично представлению Шредингера (4.15), в представлении взаимодействия, в котором волновая функция удовлетворяет соотношению

$$\psi_I(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right) \psi_S(x, t), \quad (4.29)$$

вводится оператор временной эволюции $\hat{S}(t, t_0)$:

$$\psi_I(x, t) = \hat{S}(t, t_0) \psi_I(x, t_0), \quad (4.30)$$

удовлетворяющий условию $\hat{S}(t_0, t_0) = 1$. Уравнение для него:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}_{\text{int}}(t) \hat{S}(t, t_0) \quad (4.31)$$

Проблема: записать решение уравнения (4.31) в форме аналогичной (4.17) для оператора эволюции в представлении взаимодействия нельзя даже формально, так как операторы $\hat{H}_{\text{int}}(t)$ в разные моменты времени не коммутируют, $[\hat{H}_{\text{int}}(t), \hat{H}_{\text{int}}(t')] \neq 0$.

Свойства оператора эволюции $\hat{S}(t, t_0)$ аналогичны свойствам (4.18) для оператора $\hat{U}(t, t_0)$:

$$\begin{aligned} \hat{S}(t_0, t_0) &= 1 \\ \hat{S}^\dagger(t, t_0) &= \hat{S}(t_0, t) \text{ – эрмитовость} \\ \hat{S}(t, t_0) &= \hat{S}(t, t_1) \hat{S}(t_1, t_0), \quad t > t_1 > t_0 \text{ – правило умножения} \\ \hat{S}^\dagger(t, t_0) &= \hat{S}^{-1}(t, t_0) \text{ – унитарность (сохраняет нормировку)} \end{aligned} \quad (4.32)$$

Решение уравнения (4.31) получается в виде ряда. Для этого его приводят к виду интегрального уравнения

$$\hat{S}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) \hat{S}(t_1, t_0) dt_1 \quad (4.33)$$

и далее интегрируют методом последовательных приближений.

В **нулевом** приближении $\hat{S}^{(0)}(t, t_0) = 1$.

На **первом** шаге итерации: $\hat{S}^{(1)}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) \hat{S}^{(0)}(t_1, t_0) dt_1 \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) dt_1$

На **втором** шаге (во втором порядке теории возмущений):

$$\begin{aligned} \hat{S}^{(2)}(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) \hat{S}^{(1)}(t_1, t_0) dt_1 = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_{\text{int}}(t_2) dt_2 \right] dt_1 = \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_{\text{int}}(t_2) dt_2 \end{aligned}$$

Итого:

$$\hat{S}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{S}_n(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_{\text{int}}(t_2) dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} \hat{H}_{\text{int}}(t_n) dt_n \quad (4.34)$$

где в n -ом члене суммы интегрирование производится в пространстве по области

$$t > t_1 > t_2 > \dots > t_{n-1} > t_n$$

Для более удобной записи вводят **оператор временного упорядочения (хронологизации)**

$$\hat{T} \left[\hat{A}_1(t_1) \hat{A}_2(t_2) \dots \hat{A}_n(t_n) \right]$$

Он приводит к перестановке операторов таким образом, что времена их действия возрастают **справа налево**, есть вначале на правое поле действует оператор с самым ранним временем, а последним – с самым поздним временем.

Для **фермионов** T -произведением ферми-операторов является произведение слева направо в порядке убывания времени, **умноженное на $(-1)^P$** , где P – число перестановок операторов, в результате которых получается **хронологическое произведение** операторов. Так, для пары зависящих от времени операторов:

$$\hat{T} \{ \hat{F}_1(t_1) \hat{F}_2(t_2) \} = \begin{cases} \hat{F}_1(t_1) \hat{F}_2(t_2), & t_1 > t_2 \\ -\hat{F}_2(t_2) \hat{F}_1(t_1), & t_2 > t_1 \end{cases} \quad (4.35)$$

Тогда n -й член разложения (4.34) записывается в виде:

$$\hat{S}_n(t, t_0) = \frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{T} \{ \hat{H}_{\text{int}}(t_1) \hat{H}_{\text{int}}(t_2) \dots \hat{H}_{\text{int}}(t_n) \}, \quad (4.35)$$

где оператор T расставляет операторы в правильном порядке (справа налево по времени).

Окончательно, оператор эволюции (4.34) может быть записан как:

$$\hat{S}(t, t_0) = \hat{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{\text{int}}(t') dt' \right\} \quad (4.36)$$

Итого, временная зависимость волновой функции в представлении взаимодействия может быть представлена как результат **действия оператора временной эволюции S** , который может быть представлен в виде (4.36). При этом произвольный оператор в представлении взаимодействия связан с соответствующим оператором в представлении Шредингера соотношением (4.24).

Адиабатическая гипотеза

Нестационарная теория возмущений применима, если первоначально система находилась в невозмущенном состоянии, а потом возмущение некоторым образом включается. Чтобы не возникали проблемы со сходимостью интегралов, искусственно вводят временную зависимость вида

$$\begin{cases} \hat{H} = \hat{H}_0 + e^{\alpha t} \hat{V}_{\text{int}}, & t < 0 \\ \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}}, & t > 0 \end{cases} \quad (4.37)$$

На промежутке времени $[-\infty, 0]$ происходит включение взаимодействия и предполагается, что взаимодействие включается бесконечно медленно, т.е. $\alpha \rightarrow 0$.

Используя определение (4.30), за начало отсчета берем момент времени $t_0 \rightarrow -\infty$, когда взаимодействие отсутствовало: $\psi_I(t) = \hat{S}(t, -\infty)\psi_I(-\infty) = \hat{S}(t, -\infty)\Phi_0$

В момент времени $t = 0$, когда взаимодействие включено полностью:

$$\psi_I(t=0) = \psi_S(t=0) = \psi_0 = \hat{S}(0, -\infty)\Phi_0, \text{ где } \hat{S}(0, -\infty) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \hat{S}_\alpha(0, -\infty)$$

Обозначим $\hat{S}(t) = \hat{S}(t, -\infty)$.

$$\hat{S}(t_2, t_1)\hat{S}(t_1, t_0) = \hat{S}(t_2, t_0) \text{ при } t_2 > t_1, t_1 > t_0 \quad \text{Если } t_0 = -\infty \Rightarrow \hat{S}(t_2, t_1) = \hat{S}(t_2)\hat{S}^{-1}(t_1)$$

Тогда соотношение между операторами в представлении взаимодействия и Гейзенберговскими операторами (т.е. зависящими от времени операторами):

$$\hat{F}_H(t) \equiv \tilde{F}(t) = \hat{S}^{-1}(t)\hat{F}_{\text{int}}(t)\hat{S}(t) \quad (4.38)$$

Можно показать, что связь между усреднением **по основному состоянию** от произведения Гейзенберговских операторов и операторов в представлении взаимодействия имеет вид

$$\langle \Phi_0 | \hat{T} \{ \tilde{A}(t) \tilde{B}(t_1) \tilde{C}(t_2) \dots \} | \Phi_0 \rangle = \frac{\langle \Phi_0 | \hat{T} \{ \hat{A}(t) \hat{B}(t_1) \hat{C}(t_2) \dots \hat{S}(\infty) \} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \hat{S}(\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (4.39)$$

Где операторы с “волной” – операторы в Гейзенберговском представлении, со “шляпкой” – представлении взаимодействия.

$\langle \Phi_0 | \hat{S}(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{S}(\infty) | \Phi_0 \rangle = e^{i\delta}$ - некоторый фазовый множитель.

Функция Грина (пропагатор).

Одночастичная функция Грина, или иначе пропагатор (далее используется атомная система единиц ($e = m = \hbar = 1$) записывается через полевые операторы (4.11):

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = -i \langle \Phi_0 | \hat{T} \{ \hat{\psi}_{\alpha}^{(H)}(x) \hat{\psi}_{\beta}^{(H)+}(x') \} | \Phi_0 \rangle = -i \langle \hat{T} \{ \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{\psi}_{\beta}^{+}(x') \} \rangle \quad (4.40)$$

Под x (или x') понимаем совокупность четырех переменных, координаты \mathbf{r} и времени t , а под α, β – соответствующие проекции спина частицы. Операторы поля многочастичной системы записаны в представлении Гейзенберга. Операция $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по основному состоянию системы в представлении Гейзенберга: $\langle \dots \rangle = \langle \Phi_0 | \dots | \Phi_0 \rangle$.

Оператор T – оператор временного упорядочения (4.35).

Гриновскую функцию можно вычислять с помощью, так называемой **диаграммной техники**.

С помощью функции Грина можно, в частности, вычислять матричные элементы одночастичных операторов (знаки “+”/”-” соответствуют бозонам/фермионам):

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{F} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \int \hat{\psi}^+(x) \hat{f} \hat{\psi}(x) d\vec{r} | \Phi_0 \rangle = \pm i \int \left[\lim_{\substack{t' \rightarrow t+0 \\ \vec{r}' \rightarrow \vec{r}}} \hat{f}_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}(x, x') \right] d\vec{r}$$

где $\hat{F} = \int \hat{\psi}^+(x) \hat{f} \hat{\psi}(x) d\vec{r}$ – оператор в представлении вторичного квантования (4.13).

Функция Грина невзаимодействующих частиц

Функция Грина равна (спиновые индексы опустим, т.к. в отсутствии ферромагнетизма и внешнего магнитного поля $G_{\alpha\beta} \sim \delta_{\alpha\beta}$):

$$G^{(0)}(x, x') = -i \langle \Phi_0 | \hat{T} \{ \hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x') \} | \Phi_0 \rangle = \begin{cases} -i \langle \Phi_0 | \hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x') | \Phi_0 \rangle, & t > t' \\ i \langle \Phi_0 | \hat{\psi}^+(x') \hat{\psi}(x) | \Phi_0 \rangle, & t < t' \end{cases} \quad (4.41)$$

Операторы рождения и уничтожения в случае системы невзаимодействующих частиц имеют одинаковый вид в представлениях Гейзенберга и взаимодействия:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{iI}(t) &= e^{-iE_i t} \hat{a}_j(0) = e^{-iE_i t} \hat{a}_{iS} \\ \hat{a}_{iI}^+(t) &= e^{iE_j t} \hat{a}_i^+(0) = e^{iE_j t} \hat{a}_{iS}^+ \end{aligned} \quad (4.42)$$

С учетом (4.11) после подстановки (4.42) в (4.41) получаем :

$$G^{(0)}(x, x') = -i \sum_{k > k_F} \phi_k(\vec{r}) \phi_k^*(\vec{r}') e^{iE_k(t'-t)} \text{ при } t > t' \text{ - функция Грина } \mathbf{частицы}.$$

$$G^{(0)}(x, x') = i \sum_{k < k_F} \phi_k(\vec{r}) \phi_k^*(\vec{r}') e^{iE_k(t'-t)} \text{ при } t' > t \text{ - функция Грина } \mathbf{дырки}.$$
(4.43)

Формулы (4.43) можно переписать в более общем виде (объединив частицу и дырку):

$$G^{(0)}(x, x') = -i \sum_k \phi_k^*(\vec{r}') \phi_k(\vec{r}) e^{-iE_k(t-t')} \times \begin{cases} 1 - n_k, & t > t' \\ -n_k, & t < t' \end{cases} \text{ где } n_k = \begin{cases} 1, & E_k < E_F \\ 0, & E_k > E_F \end{cases} \quad (4.44)$$

Если потенциал не зависит от времени, функция Грина зависит только от разности времен :

$$G^{(0)}(x, x') = G^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', t - t')$$

Уравнение для функции Грина

Перепишем (4.41) в виде

$$G^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', t - t') = -i \left\langle \Phi_0 \left| \hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x') \theta(t - t') - \hat{\psi}^+(x') \hat{\psi}(x) \theta(t' - t) \right| \Phi_0 \right\rangle, \text{ где } \theta(t - t') = \begin{cases} 1, & t > t' \\ 0, & t < t' \end{cases}$$

и продифференцируем по времени, учитывая, что производная от полевого оператора

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_k \hat{a}_k \phi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t} = -i \sum_k E_k \hat{a}_k \phi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t} = -i \hat{H}_0 \hat{\psi}(x),$$

а также коммутационные соотношения (4.12).

Уравнение для функции Грина невзаимодействующих частиц приобретает вид:

$$i \frac{\partial G^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', t - t')}{\partial t} - \hat{H}_0(\vec{r}) G^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}', t - t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \quad (4.45)$$

Преобразование Фурье для функции Грина:

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t - t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\vec{r}, \vec{r}', \varepsilon) \exp[-i\varepsilon(t - t')] d\varepsilon, \quad \text{где } G(\vec{r}, \vec{r}', \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\vec{r}, \vec{r}', \tau) \exp[i\varepsilon\tau] d\tau$$

Для обеспечения сходимости интегралов сдвинем энергии частиц с вещественной оси в комплексную плоскость на $i\delta$ вверх для частиц, и вниз на $i\delta$ для дырок:

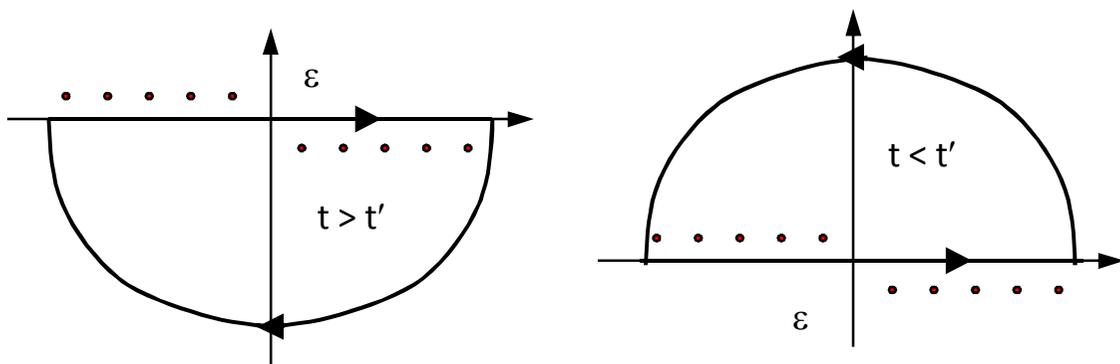
$$\int_{-\infty}^0 \exp[i(\varepsilon - E_k)t] dt = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 \exp[i(\varepsilon - E_k - i\delta)t] dt = \frac{-i}{\varepsilon - E_k - i\delta}$$

$$\int_{-\infty}^0 \exp[i(\varepsilon - E_k)t] dt = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 \exp[i(\varepsilon - E_k - i\delta)t] dt = \frac{-i}{\varepsilon - E_k - i\delta}$$

Функция Грина в энергетическом представлении оказывается равна сумме **частичной** и **дырочной** функций Грина:

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \varepsilon) = G^+(\vec{r}, \vec{r}', \varepsilon) + G^-(\vec{r}, \vec{r}', \varepsilon) = \sum_{k > k_F} \frac{\phi_k(\vec{r})\phi_k^*(\vec{r}')}{\varepsilon - E_k + i\delta} + \sum_{k < k_F} \frac{\phi_k(\vec{r})\phi_k^*(\vec{r}')}{\varepsilon - E_k - i\delta} \quad (4.46)$$

При этом **полюсами** функции Грина являются одночастичные уровни энергии E_k .



Полюса функции Грина и правила обхода на комплексной плоскости.

Знак комплексной части важен при переходе от ε к t представлению.

Функция Грина взаимодействующих частиц

Часть гамильтониана \hat{H}_{int} может быть записана через полевые операторы (4.11) как

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int \hat{\psi}_{\gamma}^{\dagger}(x_1) \hat{\psi}_{\delta}^{\dagger}(x_2) \hat{V}(x_1 - x_2) \hat{\psi}_{\delta}(x_2) \hat{\psi}_{\gamma}(x_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

где, согласно адиабатической гипотезе (4.37), оператор парного взаимодействия есть

$$\hat{V}(x_1 - x_2) = U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(t_1 - t_2) e^{-\alpha|t_1|}$$

Преобразуем полевые операторы в представлении Гейзенберга в представление взаимодействия:

$$\hat{\psi}_{\alpha}(x) = \hat{S}^{-1}(t, -\infty) \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{S}(t, -\infty)$$

$$\hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(x') = \hat{S}^{-1}(t', -\infty) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(x') \hat{S}(t', -\infty)$$

Подставим в определение функции Грина (4.40) с учетом свойств S-матрицы

$$\hat{S}(t_2, t_1) = \hat{S}(t_2) \hat{S}^{-1}(t_1) \quad \text{и} \quad \hat{S}^{\dagger}(t, t_0) = \hat{S}^{-1}(t, t_0) = \hat{S}(t_0, t) :$$

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(x, x') &= -i \langle \Phi_0 | \hat{T} \{ \hat{S}^{-1}(t) \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{S}(t) \hat{S}^{-1}(t') \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(x') \hat{S}(t') \} | \Phi_0 \rangle = \\ &= -i \langle \Phi_0 | \hat{S}^{-1}(\infty) \hat{T} \{ \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(x') \hat{S}(\infty, -\infty) \} | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (4.47)$$

Из невырожденного основного состояния квантовая система под влиянием бесконечно-медленного включения взаимодействия перейти никуда не может. В результате адиабатического включения взаимодействия волновая функция основного состояния может приобрести только **фазовый множитель**:

$$\langle \Phi_0 | \hat{S}^{-1}(\infty) = \langle \hat{S}(\infty) \Phi_0 | = e^{-i\delta} \langle \Phi_0 | = \frac{\langle \Phi_0 |}{\langle \Phi_0 | \hat{S}(\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (4.48)$$

С учетом (4.48), функция Грина (4.47) принимает вид:

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = -i \frac{\langle \Phi_0 | \hat{T} \{ \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta^+(x') \hat{S}(\infty) \} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \hat{S}(\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (4.49)$$

Здесь все операторы уничтожения и рождения записаны **в представлении взаимодействия**, а под T -произведением (4.35) в случае $t > t'$ понимаем следующее выражение:

$$\hat{T} \{ \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta^+(x') \hat{S}(\infty) \} = \hat{S}(\infty, t) \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{S}(t, t') \hat{\psi}_\beta^+(x') \hat{S}(t', -\infty)$$

В функции (4.49) разложим числитель в ряд, исходя из разложения S -матрицы (4.34-4.35), пока оставляя знаменатель неизменным

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = -\frac{i}{\langle \Phi_0 | \hat{S}(\infty) | \Phi_0 \rangle} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \langle \Phi_0 | \hat{T} \{ \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta^+(x') \hat{H}_{\text{int}}(t_1) \dots \hat{H}_{\text{int}}(t_n) \} | \Phi_0 \rangle \quad (4.50)$$

Каждый член разложения (4.50) содержит **среднее от хронологизированного произведения нескольких полевых операторов в представлении взаимодействия**.

Следует рассмотреть в общем случае выражение типа $\langle \Phi_0 | \hat{T} (\hat{A} \hat{B} \hat{C} \dots \hat{X} \hat{Y} \hat{Z}) | \Phi_0 \rangle$, где $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C} \dots \hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ - **полевые операторы в представлении взаимодействия**, причем, согласно (4.24), они совпадают с соответствующими операторами для невзаимодействующих частиц.

Важно, что каждый из операторов поля можно разбить на **два слагаемых**, соответственно, *рождения и уничтожения*. Так, “оператор уничтожения”, действуя на волновую функцию основного состояния, дает нуль. В фермионном операторе свободных частиц это часть суммы с $|\vec{p}\rangle > p_F$. Другая часть (“оператор рождения”) обладает тем свойством, что эрмитово сопряженный с ней оператор, действуя на основное состояние, дает нуль.

Введем несколько новых терминов.

1) Назовем **нормальным произведением** нескольких полевых операторов $\hat{N}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z})$ такое произведение, в котором все “операторы рождения” поставлены слева от “операторов уничтожения”, а знак соответствует четности перестановки фермиевских операторов, то есть “+” для четного числа перестановок и “-” для нечетного числа перестановок.

2) Назовем **связью** двух операторов разность $\hat{A}^c\hat{B}^c = \hat{T}(\hat{A}\hat{B}) - \hat{N}(\hat{A}\hat{B})$, где T – хронологическое произведение (4.35).

Важно отметить, что **среднее от нормального произведения** по основному (вакуумному) состоянию равно нулю, $\langle\Phi_0|\hat{N}(\hat{A}\hat{B})|\Phi_0\rangle$, и, значит, $\langle\Phi_0|\hat{A}^c\hat{B}^c|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|\hat{T}(\hat{A}\hat{B})|\Phi_0\rangle$ (4.51)

Теорема Вика для хронологизированных произведений утверждает, что если имеется некоторый набор зависящих от времени полевых операторов $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\dots\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$, то их T -произведение может быть выражено через всевозможные нормальные произведения со всеми возможными связями:

$$\hat{T}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) = \hat{N}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) + \hat{N}(\hat{A}^c\hat{B}^c\hat{C}\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) + \hat{N}(\hat{A}^c\hat{B}\hat{C}^c\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) + \dots + \hat{N}(\hat{A}^c\hat{B}^A\hat{C}^A\dots\hat{X}^c\hat{Y}^B\hat{Z}^B)$$
 (4.52)

То есть, все члены, не содержащие связей, плюс все члены, содержащие одну связь, ..., плюс все полностью спаренные члены.

Таким образом, вследствие теоремы Вика и с учетом (4.51), рассматриваемое среднее по основному состоянию $\langle \Phi_0 | \hat{T}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) | \Phi_0 \rangle$ может быть представлено в виде суммы от всех возможных произведений средних **от отдельных пар операторов**

$$\langle \Phi_0 | \hat{T}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\dots\hat{X}\hat{Y}\hat{Z}) | \Phi_0 \rangle = \langle \hat{T}(\hat{A}\hat{B}) \rangle \langle \hat{T}(\hat{C}\hat{D}) \rangle \dots \langle \hat{T}(\hat{Y}\hat{Z}) \rangle \pm \dots \pm \langle \hat{T}(\hat{A}\hat{C}) \rangle \langle \hat{T}(\hat{B}\hat{D}) \rangle \dots \langle \hat{T}(\hat{Y}\hat{Z}) \rangle \pm \dots \quad (4.53)$$

где знаки "плюс"-"минус" соответствуют четности перестановки фермиевских операторов. Отсюда следует, что число операторов каждого поля должно быть четным.

Таким образом, что среднее от T -произведения любого (четного) числа операторов поля выражается через суммы произведений **пар** операторов поля или, иначе говоря, через *произведения свободных функций Грина*.

Диаграммы Фейнмана для функций Грина.

Вернемся к разложению (4.50). Член **нулевого порядка** соответствует функции Грина системы невзаимодействующих частиц. Рассмотрим член **первого порядка**, записав выражение для оператора взаимодействия в виде

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int \hat{\psi}_{\alpha}^{+}(\vec{r}_1) \hat{\psi}_{\beta}^{+}(\vec{r}_2) V(x_1 - x_2) \hat{\psi}_{\beta}(\vec{r}_2) \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (4.54)$$

$$\text{где } V(x_1 - x_2) = U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(t_1 - t_2) e^{-\delta|t_1|}, \quad x = \{\vec{r}, t\}$$

Взаимодействие включается и выключается адиабатическим образом, поэтому $\delta \rightarrow 0$, и член первого порядка равен

$$\delta G_{\alpha\beta}^{(1)} = - \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d^4 x_1 d^4 x_2 \sum_{\delta, \gamma} \langle \hat{T} \{ \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{\psi}_{\beta}^{+}(x') \hat{\psi}_{\gamma}^{+}(x_1) \hat{\psi}_{\delta}^{+}(x_2) \hat{\psi}_{\delta}(x_2) \hat{\psi}_{\gamma}(x_1) \} \rangle V(x_1 - x_2)}{2 \langle \hat{S}(\infty) \rangle} \quad (4.55)$$

Матричный элемент под интегралом в (4.55) вычисляется согласно правилу (4.53). преобразования -произведений (5.99). Вклад дают **только спаренные члены**, их количество равно $2n+1$, так как отличны от нуля только результаты спаривания операторов рождения с операторами уничтожения, число которых равно $2n$.

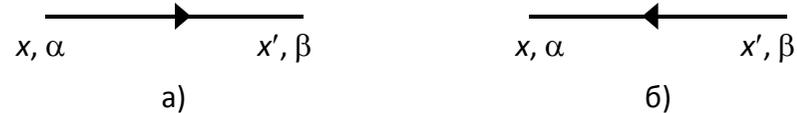
Имеем 6 слагаемых:

$$\begin{aligned}
& \langle T \{ \psi_\alpha(x) \psi_\beta^+(x') \psi_\gamma^+(x_1) \psi_\delta^+(x_2) \psi_\delta(x_2) \psi_\gamma(x_1) \} \rangle = \\
& = \langle T \{ \psi_\alpha(x) \psi_\gamma^+(x_1) \} \rangle \langle T \{ \psi_\delta^+(x_2) \psi_\delta(x_2) \} \rangle \langle T \{ \psi_\gamma(x_1) \psi_\beta^+(x') \} \rangle - \\
& - \langle T \{ \psi_\alpha(x) \psi_\gamma^+(x_1) \} \rangle \langle \psi_\delta^+(x_2) \psi_\gamma(x_1) \rangle \langle T \{ \psi_\delta(x_2) \psi_\beta^+(x') \} \rangle + \\
& + \langle T \{ \psi_\alpha(x) \psi_\delta^+(x_2) \} \rangle \langle \psi_\gamma^+(x_1) \psi_\gamma(x_1) \rangle \langle T \{ \psi_\delta(x_2) \psi_\beta^+(x') \} \rangle - \\
& - \langle T \{ \psi_\alpha(x) \psi_\delta^+(x_2) \} \rangle \langle \psi_\gamma^+(x_1) \psi_\delta(x_2) \rangle \langle T \{ \psi_\gamma(x_1) \psi_\beta^+(x') \} \rangle + \\
& + \langle T \{ \psi_\alpha(x) \psi_\beta^+(x') \} \rangle \langle \psi_\gamma^+(x_1) \psi_\gamma(x_1) \rangle \langle T \{ \psi_\delta^+(x_2) \psi_\delta(x_2) \} \rangle - \\
& - \langle T \{ \psi_\alpha(x) \psi_\beta^+(x') \} \rangle \langle \psi_\gamma^+(x_1) \psi_\delta(x_2) \rangle \langle T \{ \psi_\delta^+(x_2) \psi_\gamma(x_1) \} \rangle
\end{aligned} \tag{4.56}$$

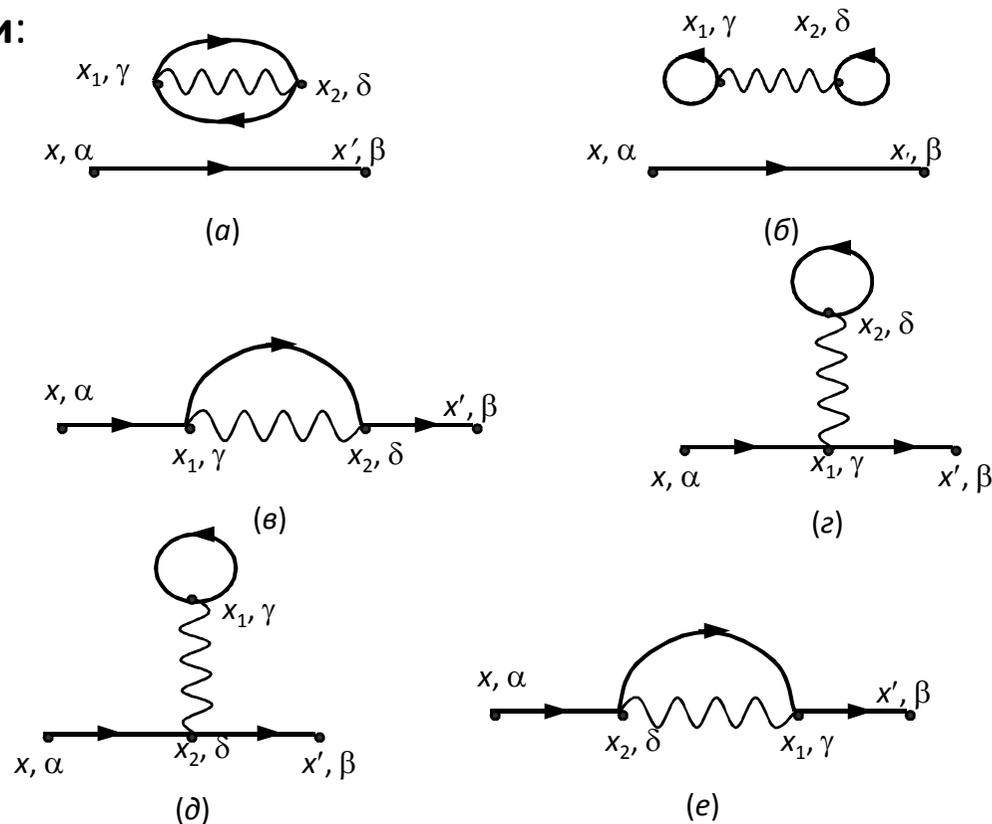
Таким образом, с учетом определения функции Грина (4.40) и разложения в ряд (4.50), первый члена разложения есть сумма членов, содержащих по три функции Грина невзаимодействующих частиц :

$$\begin{aligned}
\delta G_{\alpha\beta}^{(1)} = & -\frac{1}{2\langle S(\infty) \rangle} \int_{-\infty}^{\infty} d^4x_1 d^4x_2 \sum_{\delta,\gamma} V(x_1 - x_2) \left[iG_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') G_{\delta\gamma}^{(0)}(x_2, x_1) G_{\gamma\delta}^{(0)}(x_1, x_2) - \right. \\
& - iG_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') G_{\gamma\gamma}^{(0)}(x_1, x_1) G_{\delta\delta}^{(0)}(x_2, x_2) + iG_{\alpha\gamma}^{(0)}(x, x_1) G_{\delta\delta}^{(0)}(x_2, x_2) G_{\gamma\beta}^{(0)}(x_2, x') - \\
& - iG_{\alpha\gamma}^{(0)}(x, x_1) G_{\gamma\delta}^{(0)}(x_1, x_2) G_{\delta\beta}^{(0)}(x_2, x') + iG_{\alpha\delta}^{(0)}(x, x_2) G_{\gamma\gamma}^{(0)}(x_1, x_1) G_{\delta\beta}^{(0)}(x_2, x') - \\
& \left. - iG_{\alpha\delta}^{(0)}(x, x_2) G_{\delta\gamma}^{(0)}(x_2, x_1) G_{\gamma\beta}^{(0)}(x_1, x') \right]
\end{aligned} \tag{4.57}$$

Каждому слагаемому в (4.57) можно сопоставить в соответствие графическую диаграмму, так называемую **диаграмму Фейнмана**. Точки на плоскости изображают совокупность пространственно-временных координат, от которых зависят операторы, сплошная линия соединяет точки, входящие в качестве аргумента в одну функцию Грина $G^{(0)}(x, x')$, волнистая линия соединяет точки, входящие в парное взаимодействие $V(x_1 - x_2)$. Так, функция Грина свободной частицы (4.41) $G^{(0)}(x, x')$ графически изображается двумя диаграммами:



где (a) соответствует частице, а (б) – дырке. Поправка первого порядка (4.57) изобразится **шестью диаграммами**:



Итак:

1) Каждому члену в разложении функции Грина соответствует **диаграмма**.

Представление поправок к функции Грина в виде совокупности диаграмм возможно не только в первом, но и в любом порядке теории возмущений. Порядку теории возмущений соответствует число линий взаимодействия (или вершин) диаграммы. В свою очередь, каждой диаграмме Фейнмана соответствует аналитическое выражение. Вычисление ряда теории возмущений (4.50) сводится к изображению всех возможных диаграмм и вычислению соответствующих интегралов.

2) Диаграммы могут быть разбиты на 2 группы: **связанные** и **несвязанные**. Такое разделение возможно во всех порядках теории возмущений. **Связанные диаграммы** – это те диаграммы, у которых все точки соединены посредством линий с внешними концами x и x' . Связанные диаграммы – это те, в которых оператор поля $\hat{\psi}(x)$ спаривается с оператором $\hat{\psi}^+$ из $\hat{H}_{\text{int}}(t_1)$, $\hat{\psi}(x)$ из $\hat{H}_{\text{int}}(t_1)$ спаривается с $\hat{\psi}^+$ из $\hat{H}_{\text{int}}(t_2)$, и так далее, пока не приходим к $\hat{\psi}^+(x')$, не пропустив ни одного \hat{H}_{int} .

Несвязанные диаграммы – это те, у которых один или несколько операторов \hat{H}_{int} не связываются никакими спариваниями с $\hat{\psi}(x)$ и $\hat{\psi}^+(x')$.

Диаграммы (а) и (б) – несвязанные, (в),(г),(д),(е) – связанные.

Теорема о несвязанных диаграммах:

Вклад несвязанных диаграмм во всех порядках теории возмущений полностью компенсируется членом $\langle \hat{S}(\infty) \rangle$ входящим в знаменатель (4.50).

Таким образом, в разложении (4.50) можно опускать знаменатель $\langle \hat{S}(\infty) \rangle$ и не учитывать несвязанные диаграммы:

$$G(x, x') = -\frac{i}{\langle \hat{S}(\infty) \rangle} \left\langle \hat{T} \left\{ \hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x') \hat{S}(\infty) \right\} \right\rangle = -i \left\langle \hat{T} \left\{ \hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x') \hat{S}(\infty) \right\} \right\rangle_{\text{СВЯЗ}} \quad (4.58)$$

Кроме того, диаграммы (в) и (е), (г) и (д) отличаются друг от друга только перестановкой индексов, по которым производится интегрирование. Такие диаграммы называются **топологически эквивалентными**. Вклад от них одинаков. Число топологически эквивалентных диаграмм в поправке n -го порядка равно $n!$

Таким образом, при вычислении (4.50) можно учитывать только одну из эквивалентных диаграмм и убрать из знаменателя множитель $n!$, учитывая **только топологически неэквивалентные диаграммы**, то есть те, которые нельзя получить перестановкой \hat{H}_{int} .

3) Знак, с которым входит каждая диаграмма, определяется четностью перестановок ферми-операторов. Изменение знака связано с появлением замкнутой петли на диаграмме. Поэтому знак диаграммы определяется множителем $(-1)^m$, где m - число замкнутых петель (в диаграмме (в) $m=0$, в диаграмме (г) $m=1$).

4) Если времена в аргументе одной $G^{(0)}(x, x')$ совпадают, т.е. спариваются два оператора из одного \hat{H}_{int} , это надо понимать, как предел $\lim_{\delta \rightarrow 0} G^{(0)}(t, t + \delta) = i \langle \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \rangle$.

Диаграммная техника в координатном пространстве

Основой диаграммы является **линия**, изображающая гриновскую функцию ферми-частицы.

Стрелка на линии обозначает направление распространения:

а) линия выходит из точки с координатами x и проекцией спина α и приходит в точку с координатами x' и проекцией спина β ;

б) линия выходит из точки с координатами x' и проекцией спина β и приходит в точку с координатами x и проекцией спина α ,



а)

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') = G_{\alpha\beta}^{(0)}(x - x')$$



б)

$$G_{\beta\alpha}^{(0)}(x', x) = G_{\alpha\beta}^{(0)}(x' - x)$$

Общие правила для построения поправки **n -го порядка** к функции Грина.

1) Изображаются все **топологически неэквивалентные** диаграммы с **$2n$ вершинами** и двумя внешними концами. В каждой вершине соединяются две сплошные линии и одна волнистая линия.

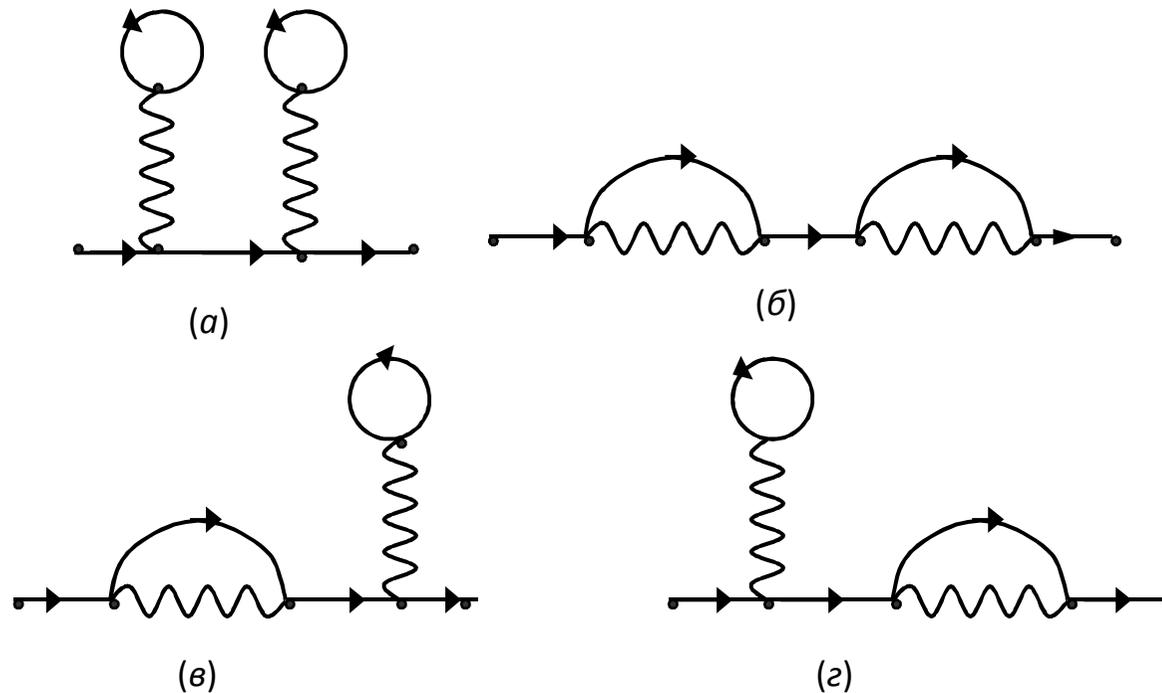
2) Каждой **сплошной линии** сопоставляется функция Грина $G_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x')$, где (x, α) – координата начала линии, (x', β) – координата конца линии.

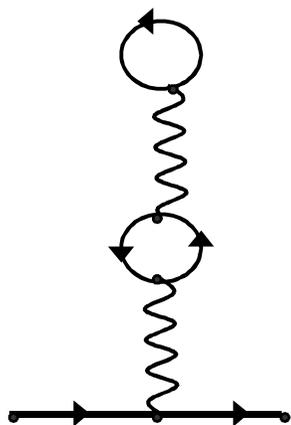
3) Каждой волнистой линии сопоставляется **парный потенциал** $V(x_1 - x_2)$.

Для мгновенного взаимодействия полагаем $V(x_1 - x_2) = U(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2) \delta(t_1 - t_2) e^{-\delta|t_1|}$.

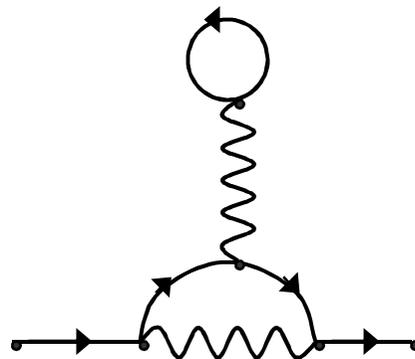
- 4) По координатам всех вершин проводим **интегрирование** : по времени от $-\infty$ до $+\infty$, по пространственным координатам – по всему объему системы, по спиновым переменным – суммирование.
- 5) Полученное выражение **умножаем на множитель** $i^n (-1)^m$: , где n – порядок диаграммы, m – число замкнутых фермионных петель.
- 6) Если в выражении входят функции Грина с совпадающими аргументами ("пузыри"), их следует считать дырочными, $G(x, x+0)$.

Пример: поправка второго порядка. Топологически неэквивалентных связанных диаграмм с 4-мя вершинами насчитывается 10 штук:

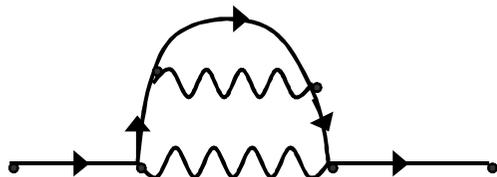




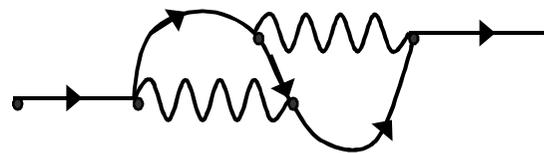
(d)



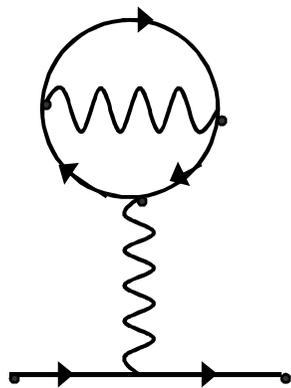
(e)



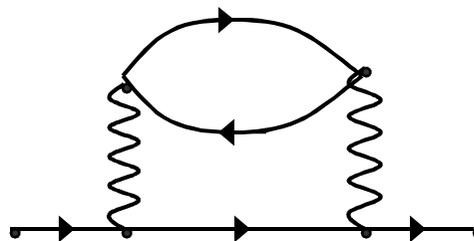
(ж)



(з)



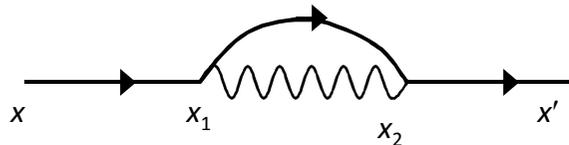
(u)



(к)

Диаграммная техника в импульсном пространстве.

Иногда оказывается удобнее проводить вычисления поправок к функции Грина в импульсном пространстве, а не в координатном. Рассмотрим диаграмму, соответствующую поправке первого порядка:



$$\delta G_{\alpha\beta}^{(1)} = i \int d^4 x_1 d^4 x_2 V(x_1 - x_2) G_{\alpha\gamma_1}^{(0)}(x - x_1) G_{\gamma_1\gamma_2}^{(0)}(x_1 - x_2) G_{\gamma_2\beta}^{(0)}(x - x')$$

Преобразование Фурье:

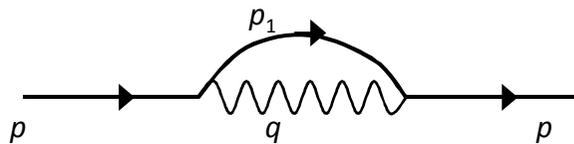
$$G_{\alpha\gamma}^{(0)}(x_1 - x_2) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} G_{\alpha\gamma}^{(0)}(p) e^{ip(x_1 - x_2)}$$

$$V(x_1 - x_2) = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} V(q) e^{iq(x_1 - x_2)}$$

где $p = (\omega, \vec{p})$, $q = (\omega, \vec{q})$, $p(x_1 - x_2) = \vec{p}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \omega(t_1 - t_2)$

После интегрирования :

$$\delta G_{\alpha\beta}^{(1)}(p, p') = i \int G_{\alpha\gamma_1}^{(0)}(p) G_{\gamma_1\gamma_2}^{(0)}(p_1) G_{\gamma_2\beta}^{(0)}(p') V(q) \delta(p - p_1 - q) \delta(p_1 + q - p') d^4 p_1 d^4 q \quad (4.59)$$



Каждой вершине соответствует δ - функция, выражающая законы сохранения импульса и энергии $\delta(\sum p) = \delta(\sum \vec{p}) \cdot \delta(\sum \omega)$.

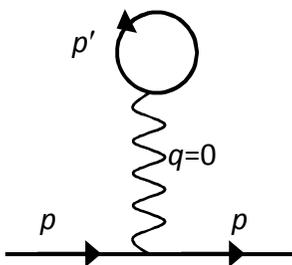
После интегрирования (4.59) по $d^4 p_1$:

$$\delta G_{\alpha\beta}^{(1)}(p, p') = \delta G^{(1)}(p) \delta(p - p') (2\pi)^4 \delta_{\alpha\beta} \quad (4.60)$$

$$\text{где } \delta G^{(1)}(p) = iG^{(0)}(p) \int G^{(0)}(p - q) V(q) \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} G^{(0)}(p)$$

Частица с импульсом p испускает квант взаимодействия с импульсом q и остается временно с импульсом $p - q$, затем поглощает его и снова распространяется с импульсом p .

Аналогично, можно написать аналитическое выражение для другой диаграммы:



$$\delta G^{(1)}(p) = -2i\delta G^{(0)}(p) V(0) \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} G^{(0)}(p_1) e^{i\omega t} G^{(0)}(p), \text{ где } t \rightarrow +0$$

Для диаграммы n -го порядка при Фурье-преобразовании функций Грина и взаимодействия проводится интегрирование по координатам $2n$ вершин. Выполняется $2n$ законов сохранения, один из которых обеспечивает равенство входящего и выходящего импульсов.

Например, диаграмма 3-го порядка:

$$\begin{aligned} p_1 &= p - q_1 \\ p_2 &= p_1 - q_2 = p - q_1 - q_2 \\ p_3 &= p - q_1 - q_2 - q_3 \end{aligned}$$

