

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ

К ТЕОРИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ МНОГИХ ЧАСТИЦ

(Представлено академиком А. Ф. Иоффе 15 X 1952)

Введение. Метод элементарных возбуждений оказался весьма полезным в ряде задач, связанных с исследованием поведения системы многих тел (^{1,2}). В то же время теоретическое вычисление спектра элементарных возбуждений пока проделано лишь в небольшом числе случаев. Сколько-нибудь общие методы расчета разработаны лишь для спектров типа Бозе (³); спектр типа Ферми, насколько нам известно, теоретически исследован лишь в предположении слабого взаимодействия между частицами (⁴).

Настоящая заметка посвящена краткому изложению метода исследования слабо возбужденных состояний системы многих частиц, не связанного с предположением о слабости взаимодействия и позволяющего выявить как фермиевскую, так и бозевскую части спектра. Ради краткости в настоящей работе мы ограничимся частицами, подчиняющимися антисимметричной статистике.

Исходные предположения. Будем считать известной волновую функцию Ψ_0 основного состояния системы; соответствующую энергию примем за нуль. Допустим, что можно указать полную ортогональную систему функций ψ_α , обладающую следующими особенностями:

1. Состояния, соответствующие индексам α , делятся на два класса: а) полностью (или почти) заполненный; б) полностью (или почти) пустой в основном состоянии системы.

2. Средние значения энергии, вычисленные при помощи функций этих двух классов, разделены щелью конечной величины. (Заметим, что отсюда еще отнюдь не следует существование какой-либо щели в энергетическом спектре системы.)

3. Матричные элементы гамильтониана, связывающие состояния классов (а) и (б), малы.

В сделанных предположениях естественно считать, что возбужденные уровни энергии системы соответствуют перебросу одной или нескольких частиц из состояний класса (а) в состояния класса (б). Малость возбуждения означает, очевидно, что число таких переброшенных частиц n мало по сравнению с общим числом частиц в системе N . Отношение n/N и является малым параметром задачи.

Волновые функции системы. Воспользуемся представлением вторичного квантования, выбрав в качестве базисной системы функции ψ_α . В силу только что высказанных соображений естественно представить функции Ψ_n возбужденных состояний системы в виде:

$$\Psi_n = L_n \Psi_0, \quad (1)$$

$$L_n = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} g_n(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_n) a_{\alpha_1}^* \dots a_{\alpha_n}^* a_{\beta_1} \dots a_{\beta_n}. \quad (2)$$

Здесь a_α^* , a_β суть обычные ферми-операторы.

Функции g_n , точный вид которых подлежит определению, обладают следующими свойствами:

А. $g_n(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_n)$ антисимметрична относительно перестановок индексов α_i между собой и β_j между собой.

Б. $g_n(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_n) \neq 0$ только если индексы α_i относятся к состояниям класса (б), а β_j — к состояниям класса (а).

Для определения функций g_n удобно воспользоваться вариационным принципом

$$\delta(\Psi_n, H\Psi_n) = 0, \quad (\Psi_n, \Psi_n) = 1. \quad (3)$$

Здесь H — гамильтониан системы, который в выбранном представлении имеет вид

$$H = \sum_{\alpha, \beta} A(\alpha; \beta) a_\alpha^* a_\beta + \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2} B(\alpha_1, \alpha_2; \beta_1, \beta_2) a_{\alpha_1}^* a_{\alpha_2}^* a_{\beta_1} a_{\beta_2}. \quad (4)$$

(функция $B(\alpha_1, \alpha_2; \beta_1, \beta_2)$ получается из обычного (антисимметризованного) матричного элемента умножением на $-1/2$).

На основании (1) можно переписать (3) в виде

$$\delta I_n \equiv \delta \{(\Psi_0, L^* [H, L] \Psi_0) - \lambda (\Psi_0, L^* L \Psi_0)\} = 0. \quad (5)$$

При этом лагранжев множитель λ определяет именно отклонение энергии системы от основного уровня.

Вариационные уравнения. Элементарные возбуждения. Явный вид уравнений для определения функций g_n легко получить, вычисляя коммутатор в (5) и варьируя I_n по g_n .

Прежде чем выписывать эти уравнения, сделаем два замечания относительно обозначений. Индекс α означает совокупность величин, характеризующих индивидуальные состояния ψ_α . По некоторым из этих величин функции $g_n(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_n)$ могут быть диагональными. В связи с этим удобно разбить α_i на две подсовокупности: $\alpha_i = \{a_i, d_i\}$ где d_i — индексы, по которым g_n диагональна, а a_i — все прочие величины, входящие в состав α_i . Таким же образом мы будем употреблять обозначения $\beta_i = \{b_i, d_i\}$, $s' = \{s', d'\}$, $s'' = \{s'', d''\}$. Функции g_n при этом удобно записать в виде

$$g_n(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_n) \equiv g_n(a_1 \dots a_n; b_1 \dots b_n | d_1 \dots d_n). \quad (6)$$

Далее, введем символ

$$\binom{\alpha_1 \dots \alpha_k}{\alpha_{k+1} \dots \alpha_n / i}$$

для обозначения разделенной на $\frac{n!}{k!(n-k)!}$ суммы по всем разбиениям совокупности n индексов i -й ($i = 1, 2$) группы на два класса по k и $n-k$ членов в каждом; отдельные слагаемые входят в сумму со знаком $+$ или $-$, в зависимости от четности перестановки, которой данное разбиение получается из начального (указанного явно).

Опуская промежуточные вычисления, выпишем окончательное уравнение для определения g_n :

$$\begin{aligned}
& n \sum_{\sigma'} \left\{ \left(\frac{\beta_1}{\beta_2 \dots \beta_n} \right)_1 A(\beta_1; \sigma') g_n(s', b_2 \dots b_n; a_1 \dots a_n | d', d_2 \dots d_n) \delta_{d', d} - \right. \\
& \left. - \left(\frac{\alpha_1 \dots \alpha_{n-1}}{\alpha_n} \right)_2 A(\sigma'; \alpha_n) g_n(b_1 \dots b_n; a_1 \dots a_{n-1}, s' | d_1 \dots d_n) \delta_{d', d_n} \right\} + \\
& \quad + n(n-1) \sum_{\sigma', \sigma''} \left\{ \left(\frac{\beta_1, \beta_2}{\beta_3 \dots \beta_n} \right) B(\beta_1, \beta_2; \sigma', \sigma'') \times \right. \\
& \quad \times g_n(s', s'', b_3 \dots b_n; a_1 \dots a_n | d', d'', d_3 \dots d_n) \delta_{d', d} \delta_{d'', d} - \\
& \quad \left. - \left(\frac{\alpha_1 \dots \alpha_{n-2}}{\alpha_{n-1}, \alpha_n} \right)_2 B(\sigma', \sigma''; \alpha_{n-1}, \alpha_n) \times \right. \\
& \quad \left. \times g_n(b_1 \dots b_n; a_1 \dots a_{n-2}, s', s'' | d_1 \dots d_n) \delta_{d', d_{n-1}} \delta_{d'', d_n} \right\} + \\
& + 2n(n+1)^2 \sum_{\sigma', \sigma''} \left\{ (2\delta_{n,1} - 1) \left(\frac{\beta_1, \beta_2}{\beta_3 \dots \beta_n, \sigma''} \right)_1 \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2 \dots \alpha_n, \sigma''} \right)_2 (\beta_1, \beta_2; \sigma', \alpha_1) \times \right. \\
& \quad \times g_n(s', s'', b_3 \dots b_n; s'', a_2 \dots a_n | d', d'', d_3 \dots d_n) \delta_{d', d} - \\
& \quad - (-1)^n \left(\frac{\beta_1 \dots \beta_{n-1}, \sigma''}{\beta_n} \right)_1 \left(\frac{\alpha_1 \dots \alpha_{n-1}}{\alpha_n, \sigma''} \right)_2 B(\sigma', \beta_n; \alpha_n, \sigma'') \times \\
& \quad \times g_n(b_1 \dots b_{n-1}, s''; a_1 \dots a_{n-1}, s' | d_1 \dots d_{n-1}, d'') \delta_{d', d''} - \\
& \quad \left. - \lambda g_n(b_1 \dots b_n; a_1 \dots a_n | d_1 \dots d_n) = 0. \right. \tag{7}
\end{aligned}$$

Уравнение (7) формально совпадает с обычным волновым уравнением проблемы $2n$ тел, записанным в некотором матричном представлении. Основываясь на этом, можно сказать, что задача о движении N частиц (например, $\sim 10^{23}$ электронов в металле) свелась к аналогичной задаче для $2n$ элементарных возбуждений — квази-частиц и соответствующих дырок. Существенно, что для слабо возбужденных состояний число n весьма мало по сравнению с N , поэтому можно надеяться получить разумные сведения об энергетическом спектре системы, исследуя только уравнения с $n = 1, 2$ (если, конечно, взаимодействие между элементарными возбуждениями не играет в данной задаче принципиальной роли). При $n = 1$ уравнение (7) превращается в следующее:

$$\sum_{\sigma'} \{ C(\beta; \sigma') g_1(\sigma'; \alpha) - C(\sigma'; \alpha) g_1(\beta; \sigma') \} - \lambda g_1(\beta; \alpha) = 0, \tag{8}$$

где

$$C(\beta; \sigma') = A(\beta; \sigma') + 4 \sum_{\sigma''} B(\beta, \sigma''; \sigma', \sigma''). \tag{9}$$

Подчеркнем, что элементарные возбуждения, представление о которых введено здесь чисто формально, фактически имеют вполне определенный физический смысл. Возбуждение системы состоит в появлении в ней некоторых особых состояний (например, правых спинов в среде левых спинов), волнообразно распространяющихся по системе; частицы, „сопоставленные“ этим волнам, и есть элементарные возбуждения.

Статистика элементарных возбуждений. Примеры. Роль волновой функции системы элементарных возбуждений играет $g_n(\alpha_1 \dots \alpha_n; \beta_1 \dots \beta_n)$; поэтому тип статистики, которой подчиняются квази-частицы, легко определяется на основании свойств симметрии g_n относительно перестановок величин, служащих их координатами. (Заметим, что эти величины отнюдь не всегда совпадают с α_i, β_j : некоторые из индексов, входящих в состав α_i, β_j , могут быть фиксированы условием Б.)

Спектр типа Ферми. Пусть роль координат элементарного возбуждения играет вся совокупность величин α_i . Тогда, очевидно, мы получаем спектр типа Ферми: элементарные возбуждения подчиняются антисимметричной статистике. Тривиальным примером является задача об электронах и дырках в ионном кристалле. В качестве ψ_α в этом случае можно взять систему ортогонализированных атомных функций; α представляет собой совокупность спинового квантового числа и номеров узла кристаллической решетки и атомного терма (с указанием природы атома).

Спектр типа Бозе. Допустим теперь, что все a_i и b_i фиксированы условием Б, причем $a_i = a_j$, $b_i = b_j$ при любых i и j . Тогда координатами элементарных возбуждений являются величины d_i . Функция g_n , очевидно, симметрична относительно перестановок d_i , и мы получаем спектр типа Бозе: элементарные возбуждения подчиняются симметричной статистике. Тривиальным примером являются спиновые волны в обменной модели. Роль ψ_α здесь играют ортогонализированные атомные функции; величины a_i , b_j суть спиновые квантовые числа, d_i — номера узлов решетки. Таким образом, бозе-спектр возникает тогда, когда квазичастица движется вместе с дыркой (или совпадает с ней, как в случае спиновых волн). В более сложных случаях, когда индексы a , b не должны удовлетворять столь жестким условиям, повидимому, возможно появление смешанного спектра.

Пользуюсь случаем выразить глубокую благодарность Н. Н. Боголюбову и Ф. Ф. Волькенштейну за интерес к работе и ценную дискуссию.

Московский электротехнический институт
связи

Поступило
30 IX 1952

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Л. Ландау, Е. Лифшиц, Статистическая физика, 1951. ² С. В. Вонсовский, Сборн. памяти С. И. Вавилова, изд. АН СССР, М., 1952, стр. 363. ³ Н. Н. Боголюбов, Лекції з квантової статистики, Киев, 1949. ⁴ В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, ДАН, 76, 817 (1951).